演習現代の量子力学

J. J. サクライの問題解説

大槻義彦監修
飯高敏晃他著

物理学叢書
別巻

吉岡書店

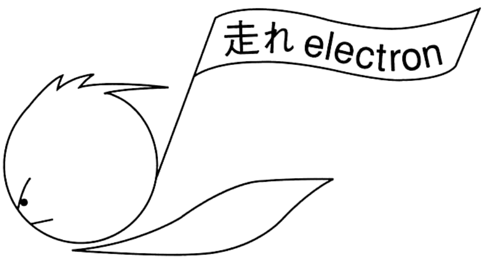
演習現代の量子力学

— J. J. サクライの問題解説 —

大槻義彦監修
飯　高　敏　晃
仲　田　和　彦
八　柳　祐　一
髙　倉　　　達
髙　島　　　健
共　著

物理学叢書
(別　巻)

吉岡書店


走れ electron

まえがき

本書は、J.J. サクライの教科書「現代の量子力学」（吉岡書店）の章末問題の解説である。この問題解説ができあがったきっかけは、昨年度、早稲田大学の物理学科、応用物理学科の、はじめて量子力学を学ぶ学部3年生を対象に行った演習である。本書はこの一年間の演習の授業を反映しており、物理を学ぶ学生にとって最適の問題集となるであろう。

一方、世の中の流れを見ると、科学技術の発展の結果、広い範囲の科学者・技術者にとっても量子力学の基礎概念にたいする深い理解が不可欠となってきている。本書では、この点を考慮して、物理学科の学生だけでなく、「現代の量子力学」の内容を具体的な問題を解いて体得しようと考える理工系一般の学部生、大学院生のための参考書となるよう努力した。また、さらに従来の問題集に飽きたらない人は、本書に新しいタイプの問題を見いだすだろう。

本来、「現代の量子力学」は、一度量子力学の入門を学んだことのある学生を対象に書かれた教科書であるので、3年生を対象に使用するには基本的な波動方程式の解法に関するワークシートによる演習をあらかじめ行う必要があった。予備知識としては、線形代数、複素積分、微分方程式の解法の基礎を想定した。また、週1回という限られた時間のなかで、量子力学の基礎概念の修得に重点を置くために、演習は第1章（基礎概念）、第2章（量子ダイナミックス）、第5章（摂動論）の3つの章（と第3章の極一部）に限った。残りの章については、学生諸君が自主ゼミを開いて勉強していたようである。

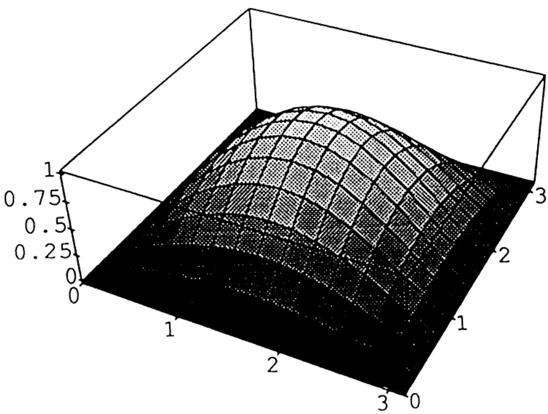
量子力学に魅せられた人々の学習に本書が大いに役立つことを、著者一同心から願っている。

1992年9月　著者代表　飯高敏晃

目　次

第 1 章

基礎概念



問 1　次式を証明せよ。

$$[AB, CD] = -AC\{D, B\} + A\{C, B\}D - C\{D, A\}B + \{C, A\}DB$$

［解答］

$$\begin{aligned}
\text{左辺} &= ABCD - CDAB \\
\text{右辺} &= -ACDB - ACBD + ACBD + ABCD \\
&\quad -CDAB - CADB + CADB + ACDB \\
&= ABCD - CDAB \\
\therefore \text{左辺} &= \text{右辺}
\end{aligned}$$

問 2　2×2 行列 X が、a_0 , a_k $(k = 1, 2, 3)$ を数として

$$X = a_0 I + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}$$

のように書けるとしよう。

a. a_0 および a_k $(k = 1, 2, 3)$ は、$\mathrm{tr}(X)$ および $\mathrm{tr}(\sigma_k X)$ とどのような関係にあるか。

b. a_0 および a_k を行列要素 X_{ij} を用いて表せ。

［解答］

a. 演算子 σ_z の固有ケットを基底として行列で表示すると

$$\begin{aligned}
\mathbf{I} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{1}$$

となるので、

$$\mathrm{tr}(\mathbf{I}) = 2, \quad \mathrm{tr}(\sigma_1) = \mathrm{tr}(\sigma_2) = \mathrm{tr}(\sigma_3) = 0 \tag{2}$$

となる。したがって、$\mathrm{tr}(X)$ と a_0 の関係

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}(X) &= \mathrm{tr}(a_0\mathbf{I} + a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3) \\
&= a_0\mathrm{tr}(\mathbf{I}) + a_1\mathrm{tr}(\sigma_1) + a_2\mathrm{tr}(\sigma_2) + a_3\mathrm{tr}(\sigma_3) \\
&= 2a_0
\end{aligned}$$

が得られる。

つぎに、式 (1) を代入して確かめられる、演算子 σ_i の積

$$\begin{aligned}\sigma_1\sigma_2 &= -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3\\ \sigma_2\sigma_3 &= -\sigma_3\sigma_2 = i\sigma_1\\ \sigma_3\sigma_1 &= -\sigma_1\sigma_3 = i\sigma_2\end{aligned}$$

および

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \mathbf{I} \tag{3}$$

に注目しよう。この関係式を使って、$\mathrm{tr}(\sigma_1)$ と a_1 の関係

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\sigma_1 X) &= \mathrm{tr}(a_0\sigma_1 + a_1\sigma_1^2 + a_2\sigma_1\sigma_2 + a_3\sigma_1\sigma_3)\\ &= a_0\mathrm{tr}(\sigma_1) + a_1\mathrm{tr}(\mathbf{I}) + a_2\mathrm{tr}(i\sigma_3) + a_3\mathrm{tr}(-i\sigma_2)\\ &= 2a_1\end{aligned}$$

が求められる。同様にして、$\mathrm{tr}(\sigma_2)$ と a_2 および $\mathrm{tr}(\sigma_3)$ と a_3 の関係

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\sigma_2 X) &= \mathrm{tr}(a_0\sigma_2 + a_1\sigma_2\sigma_1 + a_2\sigma_2^2 + a_3\sigma_2\sigma_3)\\ &= a_0\mathrm{tr}(\sigma_2) + a_1\mathrm{tr}(-i\sigma_3) + a_2\mathrm{tr}(\mathbf{I}) + a_3\mathrm{tr}(i\sigma_1)\\ &= 2a_2\\ \mathrm{tr}(\sigma_3 X) &= \mathrm{tr}(a_0\sigma_3 + a_1\sigma_3\sigma_1 + a_2\sigma_3\sigma_2 + a_3\sigma_3^2)\\ &= a_0\mathrm{tr}(\sigma_3) + a_1\mathrm{tr}(i\sigma_2) + a_2\mathrm{tr}(-i\sigma_1) + a_3\mathrm{tr}(\mathbf{I})\\ &= 2a_3\end{aligned}$$

が得られる。

b. 前問より

$$\begin{aligned}a_0 &= \mathrm{tr}(X)/2 &&= (X_{11} + X_{22})/2\\ a_1 &= \mathrm{tr}(\sigma_1 X)/2 &&= (X_{21} + X_{12})/2\\ a_2 &= \mathrm{tr}(\sigma_2 X)/2 &&= (X_{21} - X_{12})/2i\\ a_3 &= \mathrm{tr}(\sigma_3 X)/2 &&= (X_{11} - X_{22})/2\end{aligned}$$

問 3　2×2 行列 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}$ の行列式は

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\rightarrow\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}'\equiv\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a})\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)$$

の下で不変であることを示せ。
$\hat{\boldsymbol{n}}$ が z 軸の正方向を向いているとき、a'_k を a_k で表し、その結果を解釈せよ。

［解答］

$$\exp\left(\frac{+i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)=I$$

であるから、

$$\left|\exp\left(\frac{+i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)\right|\times\left|\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)\right|=1$$

となることを用いる。

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}| &= \left|\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)\right|\times|\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}|\times\left|\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)\right| \\ &= \left|\exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)\right|\times\left|\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)\right|\times|\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}| \\ &= |\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}|\end{aligned}$$

$\hat{\boldsymbol{n}}$ が z 軸の正方向を向いている場合を考えるために、つぎの 3 つの等式に注目する。まず σ_z 同士は交換するので、

$$\exp\left(\frac{i\sigma_z\phi}{2}\right)\sigma_z\exp\left(\frac{-i\sigma_z\phi}{2}\right)=\sigma_z \tag{1}$$

となる。つぎに σ_x については

$$\begin{aligned}&\exp\left(\frac{i\sigma_z\phi}{2}\right)\sigma_x\exp\left(\frac{-i\sigma_z\phi}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{+i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{+i\phi/2}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \begin{pmatrix} 0 & e^{+i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \cos\phi + i\sin\phi \\ \cos\phi - i\sin\phi & 0 \end{pmatrix} \\
&= \cos\phi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \sin\phi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\
&= \sigma_x \cos\phi - \sigma_y \sin\phi \qquad (2)
\end{aligned}
$$

となる。同様にして σ_y については

$$
\begin{aligned}
&\exp\left(\frac{i\sigma_z\phi}{2}\right)\sigma_y \exp\left(\frac{-i\sigma_z\phi}{2}\right) \\
&= \begin{pmatrix} e^{+i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{+i\phi/2} \end{pmatrix} \\
&= \sigma_y \cos\phi + \sigma_x \sin\phi \qquad (3)
\end{aligned}
$$

上の 3 式から

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}' &= \exp\left(\frac{i\sigma_z\phi}{2}\right)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a})\exp\left(\frac{-i\sigma_z\phi}{2}\right) \\
&= \exp\left(\frac{i\sigma_z\phi}{2}\right)(\sigma_x a_x + \sigma_y a_y + \sigma_z a_z)\exp\left(\frac{-i\sigma_z\phi}{2}\right) \\
&= a_x(\sigma_x\cos\phi - \sigma_y\sin\phi) + a_y(\sigma_y\cos\phi + \sigma_x\sin\phi) + a_z\sigma_z \\
&= \sigma_x(a_x\cos\phi + a_y\sin\phi) + \sigma_y(-a_x\sin\phi + a_y\cos\phi) + a_z\sigma_z
\end{aligned}
$$

よって

$$
\begin{pmatrix} a'_x \\ a'_y \\ a'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \qquad (4)
$$

と書ける。つまり、$\boldsymbol{a}'$ は $\boldsymbol{a}$ を z- 軸のまわりに $(-\phi)$ 回転したものである。

以上の結果は、第 3 章で習うように演算子

$$
\mathcal{D}(\boldsymbol{n}, \phi) = \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{2}\right)
$$

が、$\boldsymbol{\sigma}$ を $\hat{\boldsymbol{n}}$ を軸として角度 ϕ 回転させる **回転演算子** であることからも理解できる。

問 4 ブラ・ケット代数を用いて、次式を証明あるいは計算せよ。
a. X と Y を演算子とするとき，$\mathrm{tr}(XY)=\mathrm{tr}(YX)$

b. X と Y を演算子とするとき，$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$

c. A が **エルミート演算子** でその固有値がわかっているとき、$\exp[if(A)]$ のブラ・ケット形式

d. $|a'\rangle$ がエルミート演算子 A の固有ベクトルとして、$\phi_{a'}(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}'|a'\rangle$ と書くとき、$\sum_{a'}\phi^*_{a'}(\mathbf{x}')\phi_{a'}(\mathbf{x}'')$

［解答］

a.

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}(XY) &= \sum_a \langle a|XY|a\rangle \\
&= \sum_a \langle a|X\ \mathbf{I}\ Y|a\rangle = \sum_a \langle a|X\ (\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|)\ Y|a\rangle \\
&= \sum_a\sum_{a'}\langle a|X|a'\rangle\langle a'|Y|a\rangle = \sum_a\sum_{a'}\langle a'|Y|a\rangle\langle a|X|a'\rangle \\
&= \sum_{a'}\langle a'|Y\ \left(\sum_a |a\rangle\langle a|\right)\ |X|a'\rangle = \sum_{a'}\langle a'|YX|a'\rangle \\
&= \mathrm{tr}(YX)
\end{aligned}$$

b. 任意のケット $|\alpha\rangle$ と **双対関係** にあるブラ $\langle\alpha|$ を

$$\begin{array}{c} |\alpha\rangle \\ \updownarrow DC \\ \langle\alpha| \end{array}$$

とあらわすことにすると

$$\begin{array}{c} Y|\alpha\rangle \\ \updownarrow DC \\ \langle\alpha|Y^\dagger \end{array}$$

であるから、

$$\begin{array}{ccccc}
(XY)|\alpha\rangle & \overset{\text{結合則}}{=} & X\,(Y|\alpha\rangle) & & \\
\updownarrow DC & & \updownarrow DC & & \\
\langle\alpha|(XY)^\dagger & & \left(\langle\alpha|Y^\dagger\right)X^\dagger & \overset{\text{結合則}}{=} & \langle\alpha|\left(Y^\dagger X^\dagger\right)
\end{array}$$

よって

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$$

が成り立つ。

c. $|a'\rangle$ をエルミート演算子 A の規格化した固有ケット（固有値 a'）とすると、$|a'\rangle$ の組は **規格直交完全系** をつくる。

$$\langle a''|a'\rangle = \delta_{a''a'} \quad \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'| = \mathbf{I}$$

このことを使うと、

$$\begin{aligned} \exp[if(A)] &= \exp[if(A)]\,\mathbf{I} \\ &= \exp[if(A)]\left(\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\right) \\ &= \sum_{a'} \exp[if(A)]\,|a'\rangle \quad \langle a'| \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \quad \exp[if(a')] \quad \langle a'| \end{aligned}$$

が示せる。

d. $|a\rangle$ をエルミート演算子 A の規格化した固有ケットとすると、

$$\begin{aligned} \sum_{a'} \phi^*_{a'}(\mathbf{x}')\phi_{a'}(\mathbf{x}'') &= \sum_{a'} \langle a'|\boldsymbol{x}'\rangle\langle \boldsymbol{x}''|a'\rangle = \sum_{a'} \langle \boldsymbol{x}''|a'\rangle\langle a'|\boldsymbol{x}'\rangle \\ &= \langle \boldsymbol{x}''| \quad (\sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|) \quad |\boldsymbol{x}'\rangle = \langle \boldsymbol{x}''|\boldsymbol{x}'\rangle \\ &= \delta(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'') \end{aligned}$$

となる。

問 5

a. 二つのケット $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ を考える。基底ケットの完全系をつくる $|a'\rangle, |a''\rangle, \cdots$ にたいして、$\langle a'|\alpha\rangle, \langle a''|\alpha\rangle, \cdots$ および $\langle a'|\beta\rangle, \langle a''|\beta\rangle, \cdots$ がすべて分かっているとする。この基底で演算子 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ の行列表現を求めよ。

b. 次にスピン $\frac{1}{2}$ の系を考え、$|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ をそれぞれ $|S_z = +\hbar/2\rangle$ と $|S_x = +\hbar/2\rangle$ とする。$|\alpha\rangle\langle\beta|$ に対応する正方行列を、通常の基底（S_z が対角的）で具体的に書き下せ。

［解答］

a.

$$
\begin{aligned}
|\alpha\rangle\langle\beta| &\doteq \begin{pmatrix} \langle a'|\alpha\rangle\langle\beta|a'\rangle & \langle a'|\alpha\rangle\langle\beta|a''\rangle & \cdots \\ \langle a''|\alpha\rangle\langle\beta|a'\rangle & \langle a''|\alpha\rangle\langle\beta|a''\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \langle a'|\alpha\rangle\langle a'|\beta\rangle^* & \langle a'|\alpha\rangle\langle a''|\beta\rangle^* & \cdots \\ \langle a''|\alpha\rangle\langle a'|\beta\rangle^* & \langle a''|\alpha\rangle\langle a''|\beta\rangle^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

b.

$$
|S_x = +\hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle
$$

より、

$$
\begin{aligned}
\langle +|S_z = +\hbar/2\rangle = 1 \quad \langle +|S_x = +\hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
\langle -|S_z = +\hbar/2\rangle = 0 \quad \langle -|S_x = +\hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}
\end{aligned}
$$

を得る。したがって、

$$
|\alpha\rangle\langle\beta| \doteq \begin{pmatrix} 1 \times \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \times \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \times \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \times \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

問 6　$|i\rangle$ と $|j\rangle$ をある **エルミート演算子** A の固有ケットとする。どのような条件の下で、$|i\rangle + |j\rangle$ も演算子 A の固有ケットであるといえるか。答えが正しいことを説明せよ。

［解答］

2 つのケット $|i\rangle,|j\rangle$ はエルミート演算子 A の固有ケットだから、

$$\begin{aligned} A|i\rangle &= a_i|i\rangle \\ A|j\rangle &= a_j|j\rangle \end{aligned}$$

となる。　演算子 A にケット $|i\rangle + |j\rangle$ を作用させると、

$$A(|i\rangle + |j\rangle) = a_i|i\rangle + a_j|j\rangle$$

となる。ケット $|i\rangle + |j\rangle$ が演算子 A の固有ケットになる条件は、$|i\rangle$ と $|j\rangle$ に対する固有値が等しい（$a_i = a_j$）、つまり **縮退** していることである。

【Q & A】

Q：ブラとケットの次元は何か？

A：ブラとケットは、**クロネッカーのデルタ** をつかって、

$$\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''} \quad \text{（無次元）}$$

のように **規格化** されているので、ブラもケットも無次元であると考えられる。このことは、たとえば、量子力学の **確率の仮定** より物理系の状態ケットが $|\alpha\rangle$ で与えられたとき、離散的スペクトルをもつ **観測量** A を測定して、ある特定の固有状態 $|a'\rangle$ にあることを見いだす確率（無次元）が $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$ で与えられることからもわかる。また、$\langle a'|x|a'\rangle = \bar{x}$ のように、長さの次元をもった演算子 x の期待値が長さの次元をもった実数 $\bar{x}$ になることともつじつまが合う。

問 7 **エルミート演算子** A の固有ケット $\{|a'\rangle\}$ で張られるケット空間を考える。縮退はないとする。

a.

$$\prod_{a_i}(A - a_i)$$

は零演算子であることを証明せよ。

b.

$$\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)}$$

はどのような意味のある演算子か。

c. A をスピン 1/2 の系の S_z に等しいと置き、(a.) と (b.) を説明せよ。

［解答］

a. まず、演算子 A の任意の固有ケット $|a_k\rangle$ に問題の演算子 $\prod_{a_i}(A - a_i)$ を作用させてみる。

$$A|a_k\rangle = a_k|a_k\rangle$$

だから、

$$\begin{aligned} & \prod_{a_i}(A - a_i)|a_k\rangle \\ = \; & (A - a_1)(A - a_2)\cdots(A - a_k)\cdots|a_k\rangle \\ = \; & (a_k - a_1)(a_k - a_2)\cdots(a_k - a_k)\cdots|a_k\rangle \\ = \; & (a_k - a_1)(a_k - a_2)\cdots\times 0 \times\cdots|a_k\rangle \\ = \; & 0 \end{aligned} \tag{1}$$

となる。

問題のケット空間の任意のケット $|\beta\rangle$ は $\{|a'\rangle\}$ を基底として

$$|\beta\rangle = \sum_{a'} C_{a'}|a'\rangle$$

と展開されるので、式 (1) をつかって

$$\prod_{a_i}(A - a_i)|\beta\rangle \;=\; \prod_{a_i}(A - a_i)\sum_{a'} C_{a'}|a'\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{a'} C_{a'} (\prod_{a_i} (A - a_i)|a'\rangle) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

となる。よって、$\prod_{a_i}(A-a_i)$ は <u>零演算子</u> である。

b. まず、演算子 A の任意の固有ケット $|a_k\rangle$ を問題の演算子 $\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A-a_i)}{(a_j-a_i)}$ に作用させてみる。

$$
\begin{aligned}
&\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A-a_i)}{(a_j-a_i)} \;\; |a_k\rangle \\
&= \frac{(A-a_1)}{(a_j-a_1)} \frac{(A-a_2)}{(a_j-a_2)} \cdots \frac{(A-a_{j-1})}{(a_j-a_{j-1})} \frac{(A-a_{j+1})}{(a_j-a_{j+1})} \cdots |a_k\rangle
\end{aligned}
$$

$k \neq j$ と $k = j$ の二つの場合に分けて考える。

k ≠ j のとき、設問 (**a.**) と同様にして、分子の因子のうちの一つ $(A-a_k)$ がゼロになる。縮退はないので分母はゼロにならない。したがって、

$$
\begin{aligned}
&\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A-a_i)}{(a_j-a_i)} |a_k\rangle \\
&= \frac{(a_k-a_1)}{(a_j-a_1)} \cdots \frac{(a_k-a_k)}{(a_j-a_1)} \cdots \frac{(a_k-a_{j-1})}{(a_j-a_{j-1})} \frac{(a_k-a_{j+1})}{(a_j-a_{j+1})} \cdots |a_k\rangle \\
&= \frac{(a_k-a_1)}{(a_j-a_1)} \cdots \times 0 \times \cdots \frac{(a_k-a_{j-1})}{(a_j-a_{j-1})} \frac{(a_k-a_{j+1})}{(a_j-a_{j+1})} \cdots |a_k\rangle \\
&= 0
\end{aligned}
$$

となる。

k = j のとき、$(A-a_k)$ の因子がないので

$$
\begin{aligned}
&\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A-a_i)}{(a_j-a_i)} |a_j\rangle \\
&= \frac{(a_j-a_1)}{(a_j-a_1)} \frac{(a_j-a_2)}{(a_j-a_2)} \cdots \frac{(a_j-a_{j-1})}{(a_j-a_{j-1})} \frac{(a_j-a_{j+1})}{(a_j-a_{j+1})} \cdots |a_j\rangle \\
&= 1 \times 1 \times \cdots \times 1 \times 1 \times \cdots |a_j\rangle \\
&= |a_j\rangle
\end{aligned}
$$

となる。

よって、一般に

$$\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)} \ |a_k\rangle = \delta_{jk} \ |a_k\rangle$$

と書ける。

任意のケット $|\beta\rangle$ に $\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)}$ を作用させてみよう。$|\beta\rangle$ は $\{|a'\rangle\}$ を基底として

$$|\beta\rangle = \sum_{a'} C_{a'} |a'\rangle$$

と展開されるので、

$$\begin{aligned}
\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)} |\beta\rangle &= \prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)} \sum_{a'} C_{a'} |a'\rangle \\
&= \sum_{a'} C_{a'} \Big(\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)} |a'\rangle \Big) \\
&= \sum_{a'} C_{a'} \ \delta_{a_j a'} \ |a'\rangle \\
&= C_{a_j} |a_j\rangle
\end{aligned}$$

となる。よって、$\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)}$ は任意のケット $|\beta\rangle$ から $|a_j\rangle$ の成分だけをとりだす **射影演算子** である。

c. 演算子 $A = S_z$ とおくと、S_z の固有値固有ケットは

$$\begin{aligned}
S_z |+\rangle &= +\frac{\hbar}{2} |+\rangle \\
S_z |-\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |-\rangle
\end{aligned}$$

である。

(a.) 零演算子は

$$\prod_{a'} (A - a') = (S_z - \frac{\hbar}{2})(S_z + \frac{\hbar}{2}) \tag{2}$$

となる。

この演算子を任意のケット $|\beta\rangle = C_+|+\rangle + C_-|-\rangle$ に作用させてみよう。

$$
\begin{aligned}
& (S_z - \frac{\hbar}{2})\,(S_z + \frac{\hbar}{2})\,|\beta\rangle \\
= \;& (S_z - \frac{\hbar}{2})\,(S_z + \frac{\hbar}{2})\,(\,C_+|+\rangle + C_-|-\rangle\,) \\
= \;& C_+\,(S_z - \frac{\hbar}{2})\,(S_z + \frac{\hbar}{2})\,|+\rangle + C_-\,(S_z - \frac{\hbar}{2})\,(S_z + \frac{\hbar}{2})\,|-\rangle \\
= \;& 0
\end{aligned}
$$

となって、実際に零演算子になっている。

(b.) 射影演算子は、 $A = S_z, a_j = +\hbar/2$ とすれば、

$$
\prod_{a_i \neq a_j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)} = \frac{(S_z + \hbar/2)}{(\hbar/2 + \hbar/2)} = \frac{1}{\hbar}(S_z + \frac{\hbar}{2}) \tag{3}
$$

となる。この演算子を任意のケット $|\beta\rangle = C_+|+\rangle + C_-|-\rangle$ に作用させてみよう。

$$
\begin{aligned}
& \frac{1}{\hbar}(S_z + \frac{\hbar}{2})\,|\beta\rangle \\
= \;& \frac{1}{\hbar}\,(S_z + \frac{\hbar}{2})\,(\,C_+|+\rangle + C_-|-\rangle\,) \\
= \;& C_+\,\frac{1}{\hbar}\,(S_z + \frac{\hbar}{2})\,|+\rangle + C_-\,\frac{1}{\hbar}\,(S_z + \frac{\hbar}{2})\,|-\rangle \\
= \;& C_+\,\frac{1}{\hbar}\,(\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2})\,|+\rangle + C_-\,\frac{1}{\hbar}\,(-\frac{\hbar}{2} + \frac{\hbar}{2})\,|-\rangle \\
= \;& C_+|+\rangle
\end{aligned}
$$

となって、実際に $|+\rangle$ の成分を取り出す **スピン射影演算子** になっている。また、 $a_j = -\hbar/2$ とすれば、スピン射影演算子は $\frac{-1}{\hbar}(S_z - \frac{\hbar}{2})$ となり、 $|-\rangle$ の成分を取り出す演算子になる。

問 8 $|+\rangle$ と $|-\rangle$ の **規格直交性** を用い

$$[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k, \quad \{S_i, S_j\} = \frac{\hbar^2}{2}\mathbf{I}\delta_{ij}$$

を証明せよ。ここで、

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2}(\ |+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \\ S_y &= \frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \\ S_z &= \frac{\hbar}{2}(\ |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|) \end{aligned}$$

である。

［解答］まず、$|+\rangle$ と $|-\rangle$ の規格直交性

$$\langle+|+\rangle = 1 \quad \langle+|-\rangle = 0$$
$$\langle-|+\rangle = 0 \quad \langle-|-\rangle = 1$$

を用いて、**スピン演算子の積** の規則

$$\begin{aligned} S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 &= \frac{\hbar^2}{4}\mathbf{I} \\ S_xS_y = -S_yS_x &= \frac{i\hbar}{2}S_z \\ S_yS_z = -S_zS_y &= \frac{i\hbar}{2}S_x \\ S_zS_x = -S_xS_z &= \frac{i\hbar}{2}S_y \end{aligned}$$

を証明する。

$$\begin{aligned} S_x^2 &= \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| \ + \ |-\rangle\langle+|)\frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| \ + \ |-\rangle\langle+|) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(|+\rangle\langle-|+\rangle\langle-| \ + \ |+\rangle\langle-|-\rangle\langle+| \ + \\ &\quad |-\rangle\langle+|+\rangle\langle-| \ + \ |-\rangle\langle+|-\rangle\langle+|) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}(|+\rangle\langle+| \ + \ |-\rangle\langle-|) \\ &= \frac{\hbar^2}{4}\mathbf{I} \end{aligned}$$

同様にして

$$\begin{aligned} S_y^2 &= \frac{\hbar^2}{4}\mathbf{I} \\ S_z^2 &= \frac{\hbar^2}{4}\mathbf{I} \end{aligned}$$

となる。また、

$$\begin{aligned} S_xS_y &= \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| \ + \ |-\rangle\langle+|)\frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| \ + \ |-\rangle\langle+|) \\ &= \frac{i\hbar^2}{4}(- |+\rangle\langle-|+\rangle\langle-| \ + \ |+\rangle\langle-|-\rangle\langle+| \ - \\ & \quad |-\rangle\langle+|+\rangle\langle-| \ + \ |-\rangle\langle+|-\rangle\langle+|) \\ &= \frac{i\hbar^2}{4}(|+\rangle\langle+| \ - \ |-\rangle\langle-|) \\ &= \frac{+i\hbar}{2}S_z \end{aligned}$$

同様にして

$$\begin{aligned} S_yS_x &= \frac{-i\hbar}{2}S_z \\ S_yS_z &= -S_zS_y = \frac{+i\hbar}{2}S_x \\ S_zS_x &= -S_xS_z = \frac{+i\hbar}{2}S_y \end{aligned} \tag{1}$$

となる。

つぎに、問の証明に移ろう。

$$[S_x, S_x] = [S_y, S_y] = [S_z, S_z] = 0$$

は、あきらかである。また、積の規則 (1) を用いれば簡単に

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] = & -[S_y, S_x] = & S_xS_y - S_yS_x = & \ i\hbar S_z \\ [S_y, S_z] = & -[S_z, S_y] = & S_yS_z - S_zS_y = & \ i\hbar S_x \\ [S_z, S_x] = & -[S_x, S_z] = & S_zS_x - S_xS_z = & \ i\hbar S_y \end{aligned}$$

が得られる。まとめて書けば、

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar S_k \tag{2}$$

となる。同様にして、

$$\begin{aligned} \{S_x, S_x\} &= S_xS_x + S_xS_x = 2S_x^2 = \frac{\hbar^2}{2}\mathbf{I} \\ \{S_y, S_y\} &= S_yS_y + S_yS_y = 2S_y^2 = \frac{\hbar^2}{2}\mathbf{I} \\ \{S_z, S_z\} &= S_zS_z + S_zS_z = 2S_z^2 = \frac{\hbar^2}{2}\mathbf{I} \end{aligned}$$

および、

$$\begin{aligned} \{S_x, S_y\} = \{S_y, S_x\} &= S_xS_y + S_yS_x = 0 \\ \{S_y, S_z\} = \{S_z, S_y\} &= S_yS_z + S_zS_y = 0 \\ \{S_z, S_x\} = \{S_x, S_z\} &= S_zS_x + S_xS_z = 0 \end{aligned}$$

が得られる。まとめて書くと、

$$\{S_i, S_j\} = \frac{\hbar^2}{2}\mathbf{I}\delta_{ij} \tag{3}$$

となる。

【Q＆A】

Q：アインシュタインの規則とは何か？

A：ベクトルや行列の計算を成分で表示するとき、同じ添え字が現れたら総和記号 $\sum$ がなくてもその添え字について和をとるという規則。この本でもときどきつかう。たとえば、行列のかけ算

$$A_{ij} = \sum_k B_{ik}C_{kj}$$

は、

$$A_{ij} = B_{ik}C_{kj}$$

のように表せる。

問9 図に示した角度方向にある $\hat{\boldsymbol{n}}$ に対し、$|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle$ を

$$\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\ |\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle=\left(\frac{+\hbar}{2}\right)|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle$$

となるように作れ。答を $|+\rangle$ と $|-\rangle$ の線形結合として表せ。

［解答］図より、

$$\hat{\boldsymbol{n}}=(\sin\beta\cos\alpha,\sin\beta\sin\alpha,\cos\beta)$$

だから、$|+\rangle$ と $|-\rangle$ を基底とする行列表示で

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}&=S_x\sin\beta\cos\alpha+S_y\sin\beta\sin\alpha+S_z\cos\beta\\&\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos\beta & \sin\beta e^{-i\alpha}\\ \sin\beta e^{+i\alpha} & -\cos\beta\end{pmatrix}\end{aligned}$$

となる。求める固有ケットを

$$|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle=\begin{pmatrix}\alpha_\uparrow\\ \alpha_\downarrow\end{pmatrix}$$

とおき、固有値を $(\hbar/2)\lambda$ とおくと

$$\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\ |\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle=\left(\frac{+\hbar}{2}\right)\lambda\,|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle$$

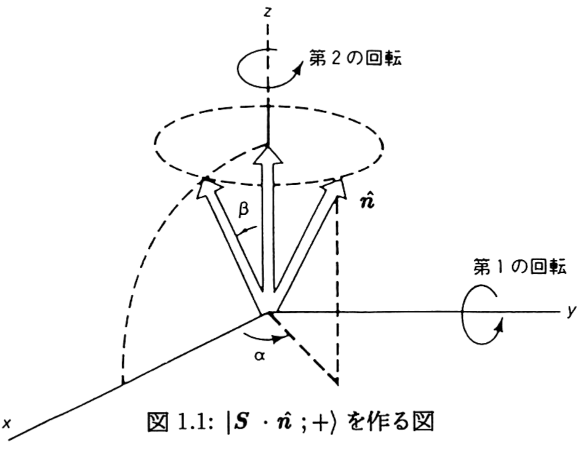


図 1.1: $|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle$ を作る図

より、

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \cos\beta-\lambda & \sin\beta e^{-i\alpha} \\ \sin\beta e^{+i\alpha} & -\cos\beta-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix}=0 \tag{1}$$

となるので、固有方程式

$$\begin{vmatrix} \cos\beta-\lambda & \sin\beta e^{-i\alpha} \\ \sin\beta e^{+i\alpha} & -\cos\beta-\lambda \end{vmatrix}=0$$

より、

$$\therefore\lambda \;=\; \pm 1$$

を得る。よって、固有値は $\pm\left(\dfrac{\hbar}{2}\right)$ である。問題では $\lambda=1$ の場合を考えているので、式 (1) に代入して

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \cos\beta-1 & \sin\beta e^{-i\alpha} \\ \sin\beta e^{+i\alpha} & -\cos\beta-1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix} &= 0 \\ \begin{pmatrix} -2\sin^2(\beta/2) & 2\cos(\beta/2)\sin(\beta/2)e^{-i\alpha} \\ 2\cos(\beta/2)\sin(\beta/2)e^{+i\alpha} & -2\cos^2(\beta/2) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix} &= 0 \end{aligned}$$

$$\therefore\begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \cos(\beta/2) \\ \sin(\beta/2)e^{+i\alpha} \end{pmatrix}$$

となるので、

$$|\boldsymbol{S}\;\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\;;+\rangle=\cos\frac{\beta}{2}|+\rangle+\sin\frac{\beta}{2}e^{+i\alpha}|-\rangle \tag{2}$$

を得る。

ついでに、$\lambda=-1$ の場合も考えておこう。式 (1) より、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \cos\beta+1 & \sin\beta e^{-i\alpha} \\ \sin\beta e^{+i\alpha} & -\cos\beta+1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix} &= 0 \\ \begin{pmatrix} 2\cos^2(\beta/2) & 2\cos(\beta/2)\sin(\beta/2)e^{-i\alpha} \\ 2\cos(\beta/2)\sin(\beta/2)e^{+i\alpha} & +2\sin^2(\beta/2) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix} &= 0 \end{aligned}$$

$$\therefore\begin{pmatrix} \alpha_\uparrow \\ \alpha_\downarrow \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -\sin(\beta/2) \\ \cos(\beta/2)e^{+i\alpha} \end{pmatrix}$$

となるので、

$$|\boldsymbol{S}\;\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\;;-\rangle=-\sin\frac{\beta}{2}|+\rangle+e^{+i\alpha}\cos\frac{\beta}{2}|-\rangle \tag{3}$$

を得る。これは、ちょうど式 (2) で

$$\begin{aligned}\alpha &\to \alpha\\ \beta &\to \beta+\pi\end{aligned}$$

という置き換えをしたことに対応している。式 (2) 、 (3) の結果は、**オイラーの回転** によって求めた結果（第 3 章問 8 参照）

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};\pm\rangle &= \mathcal{D}^{1/2}(\alpha,\beta,\gamma=0)|\pm\rangle\\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2}\cos(\beta/2) & -e^{-i\alpha/2}\sin(\beta/2)\\ e^{i\alpha/2}\sin(\beta/2) & e^{i\alpha/2}\cos(\beta/2)\end{pmatrix}|\pm\rangle\end{aligned}$$

と位相因子を除いて一致する。

【Q & A】

Q： **完全反対称テンソル** とは何か？

A：3 つの添え字のうち任意の 2 つをいれかえたときに符号が反転するテンソル ϵ_{ijk} を完全反対称テンソルという。添え字のなかに同じものが 2 つ以上あると、その添え字をいれかることで、たとえば $\epsilon_{112} = -\epsilon_{112}$ となるので $\epsilon_{112}=0$ となる。したがって、

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} \epsilon_{123}=\epsilon_{231}=\epsilon_{312} = 1\\ \epsilon_{213}=\epsilon_{132}=\epsilon_{321} = -1\\ \text{その他} = 0\end{cases}$$

と定義できる。

完全反対称テンソル をつかえば、 **外積** や行列式が

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}]_i &= \epsilon_{ijk}a_j b_k\\ |A| &= \epsilon_{ijk}a_{1i}a_{2j}a_{3_k}\end{aligned}$$

のように簡単にかける。（確かめよ）

問１０　**２準位系** のハミルトニアン演算子が、a をエネルギーの次元の数として、

$$H = a(\ |1\rangle\langle 1|\ -\ |2\rangle\langle 2|\ +\ |1\rangle\langle 2|\ +\ |2\rangle\langle 1|\ )$$

で与えられている。このエネルギー固有値と、対応するエネルギー固有ケットを（$|1\rangle$ と $|2\rangle$ の線形結合として）見いだせ。

［解答］　ケット $|1\rangle$ と $|2\rangle$ を基底として、ハミルトニアンを行列表示すると、

$$H \doteq \begin{pmatrix} a & a \\ a & -a \end{pmatrix}$$

なので、エネルギー固有値を E、固有ケットを

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

とすれば、

$$\begin{pmatrix} a-E & a \\ a & -a-E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad (1)$$

となる。したがって、固有方程式は

$$\begin{vmatrix} a-E & a \\ a & -a-E \end{vmatrix} = 0$$

となって、固有値 $E = \pm\sqrt{2}a$ を得る。

固有値 $E = +\sqrt{2}a$ のとき、式 (1) に代入して

$$\begin{pmatrix} (1-\sqrt{2})a & a \\ a & -(1+\sqrt{2})a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad (2)$$

だから、固有ケットは

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1+\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

規格化して、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{1^2+(-1+\sqrt{2})^2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1+\sqrt{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1+\sqrt{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる。固有値 $E=-\sqrt{2}a$ のときも同様にして、

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1-\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

を得る。

以上の結果をまとめると、

$$\begin{aligned} |E=+\sqrt{2}a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}\,|1\rangle + \frac{-1+\sqrt{2}}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}\,|2\rangle \\ |E=-\sqrt{2}a\rangle &= \frac{1}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}\,|1\rangle + \frac{-1-\sqrt{2}}{\sqrt{4+2\sqrt{2}}}\,|2\rangle \end{aligned}$$

となる。

問１１　ある **２準位系** がハミルトニアン

$$H = H_{11}|1\rangle\langle 1| + H_{22}|2\rangle\langle 2| + H_{12}[|1\rangle\langle 2| \ + \ |2\rangle\langle 1|]$$

で記述されている。H_{11}、H_{22} および H_{12} はエネルギーの次元の実数で、$|1\rangle$ と $|2\rangle$ は、H とは異なるある観測量の固有ケットである。エネルギー固有ケットと、対応するエネルギー固有値を求めよ。答の正しいことを $H_{12}=0$ に対して求めよ。

［解答］

問９で求めた次の関係を用いる。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{S} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\, |\hat{\boldsymbol{n}}\,;\pm\rangle &= \left(\pm\frac{\hbar}{2}\right) |\hat{\boldsymbol{n}}\,;\pm\rangle \\ |\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|-\rangle \\ |\hat{\boldsymbol{n}}\,;-\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}|+\rangle + e^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2}|-\rangle \end{aligned}$$

ただし、簡単のために **パウリのスピン行列** $\boldsymbol{\sigma}$ （$\boldsymbol{S} = (\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ ）を使って

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\,)\,|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle = (+1)\,|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle \tag{1}$$

と表しておこう。ハミルトニアン H を $|1\rangle$ と $|2\rangle$ を基底とする行列で表示すると

$$\begin{aligned} H &\doteq \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{pmatrix} \\ &= H_{12}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{H_{11}-H_{22}}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{H_{11}+H_{22}}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= H_{12}\sigma_x + \frac{H_{11}-H_{22}}{2}\sigma_z + \frac{H_{11}+H_{22}}{2}\mathbf{I} \\ &= \sqrt{H_{12}^2 + \left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2}\,\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{H_{11}+H_{22}}{2}\mathbf{I} \end{aligned}$$

と書ける。ただし、

$$\hat{n} = \left(\frac{H_{12}}{\sqrt{H_{12}^2 + \left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2}} \, , \, 0 \, , \, \frac{H_{11}-H_{22}}{2\sqrt{H_{12}^2 + \left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2}} \right)$$

$$\therefore \begin{cases} \cos\beta = \dfrac{H_{11}-H_{22}}{2\sqrt{H_{12}^2 + \left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2}} \\ \alpha = 0 \end{cases} \tag{2}$$

となる。式 (1) より、H の固有値、固有ケットが分かる。固有値

$$E = \frac{H_{11}+H_{22}}{2} + \sqrt{H_{12}^2 + \left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2}$$

に対して、固有ケットが

$$|\hat{n}\,;+\rangle = \cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|-\rangle$$

また、固有値

$$E = \frac{H_{11}+H_{22}}{2} - \sqrt{H_{12}^2 + \left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2}$$

に対して、固有ケットが

$$|\hat{n}\,;-\rangle = -\sin\frac{\beta}{2}|+\rangle + \cos\frac{\beta}{2}|-\rangle$$

である。ただし、$\cos(\beta/2)$、$\sin(\beta/2)$ は、式 (2) の $\cos\beta$ をつかって

$$\cos\frac{\beta}{2} = \sqrt{\frac{1+\cos\beta}{2}}$$
$$\sin\frac{\beta}{2} = \sqrt{\frac{1-\cos\beta}{2}}$$

によって与えられる。$H_{12} = 0, H_{11} \geq H_{22}$ のとき、式 (2) より $\cos\beta = 1$ だから、

$$|\hat{n}\,;+\rangle = |+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$|\hat{n}\,;-\rangle = |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となって正しい答をえる。

> 問１２　**スピン 1/2 の系が $\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有状態にあり、その固有値は $\hbar/2$ であることが分かっている。ここで $\hat{\boldsymbol{n}}$ は xz- 平面内の単位ベクトルで、z- 軸の正方向と γ の角度をなしている。**
> **a.** S_x を測定したとする。$+\hbar/2$ の値が得られる確率はいくらか。
>
> **b.** S_x の **分散** $\langle(S_x-\langle S_x\rangle)^2\rangle$ を計算せよ。（$\gamma=0,\pi/2,\pi$ の特別な場合に答えがあっているかどうか確かめよ）

［解答］系の状態は、

$$|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle=\cos\frac{\gamma}{2}|+\rangle+\sin\frac{\gamma}{2}|-\rangle$$

で与えられる。

a. $S_x=+\hbar/2$ が得られる確率は $|\langle S_x;+|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle|^2$ である。$|S_x;+\rangle=(|+\rangle+|-\rangle)/\sqrt{2}$ だから、

$$\begin{aligned}\langle S_x;+|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle &= \frac{\langle+|+\langle-|}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\gamma}{2}|+\rangle+\sin\frac{\gamma}{2}|-\rangle\right)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\frac{\gamma}{2}+\sin\frac{\gamma}{2}\right)\end{aligned}$$

よって、$S_x=+\hbar/2$ が得られる確率は

$$|\langle S_x;+|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle|^2=\frac{1+\sin\gamma}{2}$$

である。

b.

$$\begin{aligned}\langle(S_x-\langle S_x\rangle)^2\rangle &= \langle S_x^2-2S_x\langle S_x\rangle+\langle S_x\rangle^2\rangle\\ &= \langle S_x^2\rangle-2\langle S_x\rangle\langle S_x\rangle+\langle S_x\rangle^2\\ &= \langle S_x^2\rangle-\langle S_x\rangle^2\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle &= \langle\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+|S_x|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle\\ &= \left(\cos\frac{\gamma}{2}\langle+|+\sin\frac{\gamma}{2}\langle-|\right)\frac{\hbar}{2}\left(|+\rangle\langle-|+|-\rangle\langle+|\right)\\ &\quad\times\left(\cos\frac{\gamma}{2}|+\rangle+\sin\frac{\gamma}{2}|-\rangle\right)\\ &= \frac{\hbar}{2}2\sin\frac{\gamma}{2}\cos\frac{\gamma}{2}=\frac{\hbar}{2}\sin\gamma\end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}\langle S_x^2\rangle &= \langle \boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|S_x^2|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle = \langle \boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|\frac{\hbar^2}{4}\mathbf{I}|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{4}\end{aligned}$$

だから、

$$\langle (S_x-\langle S_x\rangle)^2\rangle = \langle S_x^2\rangle - \langle S_x\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}\cos^2\gamma \tag{1}$$

この式が $\gamma=0,\pi/2,\pi$ の特別な場合に答えがあっているか確かめてみよう。

$\gamma=0,(\pi)$ のとき、スピンは z- 軸の正（負）の方向を向いている。よって、S_x が $(+\hbar/2)$ と $(-\hbar/2)$ をとる確率は等しい。

$$P(S_x=+\hbar/2)=P(S_x=-\hbar/2)=\frac{1}{2}$$

したがって、分散は

$$\begin{aligned}\langle(\Delta S_x)^2\rangle &= \langle S_x^2\rangle - \langle S_x\rangle^2 \\ &= \left[\frac{1}{2}\left(+\frac{\hbar}{2}\right)^2+\frac{1}{2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)^2\right]-\left[\frac{1}{2}\left(+\frac{\hbar}{2}\right)+\frac{1}{2}\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\right]^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4}\end{aligned}$$

となって、式（1）で $\gamma=0,(\pi)$ とおいた値に一致する。

$\gamma=\pi/2$ のとき、スピンは x- 軸の正の方向を向いているので、S_x はつねに $+\hbar/2$ の値をとる。

$$P(S_x=+\hbar/2)=1,\qquad P(S_x=-\hbar/2)=0$$

したがって、分散はゼロになって

$$\begin{aligned}&\langle(\Delta S_x)^2\rangle \\ =\ & \langle S_x^2\rangle - \langle S_x\rangle^2 \\ =\ & \left[1\times\left(+\frac{\hbar}{2}\right)^2+0\times\left(-\frac{\hbar}{2}\right)^2\right]-\left[1\times\left(+\frac{\hbar}{2}\right)+0\times\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\right]^2 \\ =\ & 0\end{aligned}$$

実際、式（1）で $\gamma=\pi/2$ とおいた値に一致することが確かめられた。

> 問13　**スピン** $1/2$ の原子線が、一連の **シュテルン・ゲルラッハ型測定装置** を次のように通過する：
> **a.** 第1の測定では $S_z = \hbar/2$ の原子が選ばれ、$S_z = -\hbar/2$ の原子は取り除かれる。
>
> **b.** 第2の測定では $S_{\mathrm{n}} = \hbar/2$ の原子が選ばれ、$S_{\mathrm{n}} = -\hbar/2$ の原子は取り除かれる。
>
> **c.** 第3の測定では $S_z = -\hbar/2$ の原子が選ばれ、$S_z = \hbar/2$ の原子は取り除かれる。
> 第1の測定後に残った $S_z = \hbar/2$ の原子線の強度を1に規格化したとき、最後の $S_z = -\hbar/2$ の原子線の強度はいくらか。最後の $S_z = -\hbar/2$ の原子線の強度を最大にするには、第2の装置をどの方向に向けなければならないか。

［解答］　第1の測定後、状態ケットは、S_z の固有ケット

$$|+\rangle$$

になっている。

第2の測定では、スピンの $\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向成分 $\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ を測定するので、状態ケットを $|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle$ と $|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle$ を基底として分解して考える。

$$\begin{aligned}
|+\rangle &= \mathbf{I}|+\rangle \\
&= (|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle\langle\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+| + |\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle\langle\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};-|)|+\rangle \\
&= |\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle\langle\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+|+\rangle + |\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle\langle\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};-|+\rangle \\
&= \cos\frac{\beta}{2}|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle - \sin\frac{\beta}{2}|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle
\end{aligned}$$

上式の3行目から4行目へ移るのに問9の結果

$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle &= \cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|-\rangle \\
|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle &= -\sin\frac{\beta}{2}|+\rangle + \cos\frac{\beta}{2}|-\rangle
\end{aligned}$$

を用いた。第2の測定後、$|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle$ の成分だけ残るので、状態ケットは

$$\begin{aligned}
\cos\frac{\beta}{2}|\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle &= \cos\frac{\beta}{2}\left(\cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|-\rangle\right) \\
&= \cos^2\frac{\beta}{2}|+\rangle + \cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}|-\rangle
\end{aligned}$$

となる。

第 3 の測定後、$|-\rangle$ の成分だけ残るので、状態ケットは

$$\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}|-\rangle$$

となる。

最後の原子線の強度は、第 3 の測定で $S_z = -\hbar/2$ となる確率に等しいから、

$$\left(\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}\sin^2\beta$$

である。したがって、強度が最大になるのは $\beta = \pi/2$ のときである。

問１４　量子力学のある **観測量** は、次のような３×３行列で表現される：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

a. この観測量の規格化された固有ベクトルと、対応する固有値を求めよ。

b. このような観測量に対応する物理系の例をあげよ。

〔解答〕

a. 固有値を λ、固有ベクトルを

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

とすると、

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

よって、固有方程式は

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\lambda & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda(\lambda-1)(\lambda+1) = 0$$

よって、固有値は $\lambda = -1, 0, 1$ である。固有値はすべて異なるから、縮退はない。

固有値が $\lambda = -1$ のとき、

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

だから、規格化した固有ケットは

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

である。

固有値が $\lambda = 0$ のとき、

$$\begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

だから、規格化した固有ケットは

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

である。

固有値が $\lambda = +1$ のとき、

$$\begin{pmatrix} -1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

だから、規格化した固有ケットは

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ +\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

である。

b. たとえば、スピン 1 の粒子が考えられる。スピン 1 の粒子のスピン演算子 S_x を S_z の固有ケットを基底にして表現すると問の行列に $\hbar$ を掛けたものになる。

問１５　A, B を **観測量** とする。A と B の同時固有ケット $\{|a', b'\rangle\}$ が、基底ケットの **規格直交完全系** を作るとする。このとき常に **交換関係**

$$[A, B] = 0$$

を結論できるであろうか。これを正しいとするなら、証明を述べよ。正しくないとするなら、反例を与えよ。

［解答］　正しい。

まず、問題の交換子を同時固有ケット $|a', b'\rangle$ に作用させてみる。

$$\begin{aligned}[A, B]|a', b'\rangle &= (AB - BA)\,|a', b'\rangle \\ &= (a'b' - b'a')\,|a', b'\rangle \\ &= 0\end{aligned}$$

つぎに、問題の交換子を任意のケット $|\gamma\rangle$ に作用させる。同時固有ケット $\{|a', b'\rangle\}$ が、基底ケットの完全な規格直交系を作るので、任意のケット $|\gamma\rangle$ は

$$|\gamma\rangle = \sum_{a'} \sum_{b'} C_{a',b'} |a', b'\rangle$$

と書ける。よって、

$$\begin{aligned}[A, B]|\gamma\rangle &= [A, B] \sum_{a'} \sum_{b'} C_{a',b'} |a', b'\rangle \\ &= \sum_{a'} \sum_{b'} C_{a',b'} [A, B]|a', b'\rangle \\ &= 0\end{aligned}$$

となる。$[A, B]$ は任意のケットに作用して零ケットを与えるので零演算子である。

問１６　二つの **エルミート演算子** が、**反交換関係** を満たす：

$$\{A, B\} = AB + BA = 0.$$

A と B の同時（すなわち共通）固有ケットはありうるか。証明ないし例証を与えよ。

［解答］　同時固有ケットは存在できる。いま、同時固有ケット $|a, b\rangle$ があったとして、それが満たすべき条件を調べてみよう。

$$\begin{aligned}\{A, B\}|a, b\rangle &= (AB + BA)\,|a, b\rangle \\ &= (ab + ba)\,|a, b\rangle \\ &= 2ab\,|a, b\rangle \\ &= 0\end{aligned}$$

より、同時固有ケットが存在するのは固有値の積 ab がつねに 0 となる場合に限られる。

例

$$A \doteq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad B \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

は、同時固有ケット

$$|a = 1, b = 0\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |a = 0, b = 1\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を持つ。

問１７　時間にあからさまに依らない二つの **観測量** A_1、A_2 が、交換しないことが分かっている：

$$[A_1, A_2] \neq 0$$

一方また A_1、A_2 は共にハミルトニアンと交換することも分かっている：

$$[A_1, H] = 0, \quad [A_2, H] = 0$$

このエネルギー固有状態は、一般に **縮退** していることを示せ。例外はあるか。中心力の問題、$H = \boldsymbol{p}^{\,2}/2m + V(r)$ で、$A_1 \to L_z$, $A_2 \to L_x$ とした場合を例として考えるとよい。

［解答］　エネルギー固有ケットは一般に縮退していることを示したいので、エネルギー固有ケットが縮退していないと仮定して矛盾を導こう。

交換関係 $[A_1, H] = 0$ より、A_1 と H の同時固有ケット $|a_i^{(1)} E_i\rangle$ が存在して

$$\begin{aligned} A_1 |a_i^{(1)} E_i\rangle &= a_i^{(1)} |a_i^{(1)} E_i\rangle \\ H |a_i^{(1)} E_i\rangle &= E_i \ |a_i^{(1)} E_i\rangle \end{aligned}$$

となる。同様に、交換関係 $[A_2, H] = 0$ より、A_2 と H の同時固有ケット $|a_i^{(2)} E_i\rangle$ が存在して

$$\begin{aligned} A_2 |a_i^{(2)} E_i\rangle &= a_i^{(2)} |a_i^{(2)} E_i\rangle \\ H |a_i^{(2)} E_i\rangle &= E_i \ |a_i^{(2)} E_i\rangle \end{aligned}$$

となる。

いま、エネルギー固有ケットが縮退していないと仮定しているので、同じエネルギー固有値をもつ二つのケットは同一のケットと考えられる。そこで、このケットを $|E_i\rangle$ であらわそう。

$$|E_i\rangle \equiv |a_i^{(1)} E_i\rangle = |a_i^{(2)} E_i\rangle$$

すると、任意の i, j に対して

$$\begin{aligned} \langle E_i | [A_1, A_2] | E_j \rangle &= \langle E_i | A_1 A_2 - A_2 A_1 | E_j \rangle \\ &= \langle E_i | E_j \rangle (a_j^{(1)} a_j^{(2)} - a_j^{(2)} a_j^{(1)}) \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる。これは、

$$[A_1, A_2] = 0$$

を意味しており、問題の条件と矛盾する。このようなことが起こったのは、エネルギー固有ケットが縮退していないという誤った仮定をしたためであり、エネルギー固有ケットが一般に縮退していることの証明になっている。

中心力の問題を例として考えよう。ハミルトニアン H は、極座標を用いて

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\boldsymbol{L}^{\,2}}{2mr^2} + V(r)$$

と書ける。ただし、$\boldsymbol{L} = (L_x, L_y, L_z)$ は **軌道角運動量** 演算子で極座標で

$$\begin{aligned} L_x &= -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_y &= -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \\ L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned}$$

とあらわされ、交換関係

$$[L_z, L_x] = i\hbar L_y \neq 0 \quad [L_x, \boldsymbol{L}^{\,2}] = 0 \quad [L_z, \boldsymbol{L}^{\,2}] = 0$$

などを満たす。（第 3 章参照）よって、演算子 $\boldsymbol{L}$ が変数 r をふくまないことに注意すれば、

$$\begin{aligned} [L_z, L_x] &= i\hbar L_y \neq 0 \\ [L_x, H] &= [L_x, \frac{\boldsymbol{L}^{\,2}}{2mr^2}] = 0 \\ [L_z, H] &= [L_z, \frac{\boldsymbol{L}^{\,2}}{2mr^2}] = 0 \end{aligned}$$

となって、問の条件を満たす。実際、中心力問題のエネルギー固有値は **磁気量子数 m に関する縮退** があるので問の結果と一致している。

ただし、$[A_1, A_2] \neq 0$ であっても、$[A_1, A_2]|\gamma\rangle = 0$ を満たす部分ケット空間だけを考えれば縮退はなくてもよい。例えば、中心力問題で s 状態だけを考えれば、

$$[L_z, L_x]|l = 0\rangle = i\hbar L_y|l = 0\rangle = 0$$

であり、磁気量子数は $m = 0$ だけなので縮退はない。

問１８

a. **シュヴァルツの不等式** を最も簡単に導くには、次のようにする。まず、任意の複素数 λ に対して

$$(\langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|)\cdot(|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) \geq 0$$

であることに注目する。次にこの不等式がシュヴァルツの不等式になるように λ を選ぶ。

b. 一般化された **不確定関係** の式で等号が成り立つのは、問題とする状態が

$$\Delta A|\rangle = \lambda\Delta B|\rangle$$

をみたし、λ が純虚数である場合であることを示せ。

c. 波動力学の通常の規則を用いた計算により、**ガウスの波束** の波動関数

$$\langle x'|a\rangle = (2\pi d^2)^{-1/4}\exp\left[\frac{i\langle p\rangle x'}{\hbar} - \frac{(x' - \langle x\rangle)^2}{4d^2}\right]$$

は、**最小不確定関係**

$$\sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle}\sqrt{\langle(\Delta p)^2\rangle} = \frac{\hbar}{2}$$

を満たすことが示せる。このガウス波束に対しては、(b.) で示した条件と一致して

$$\langle x'|\Delta x|\alpha\rangle = （純虚数）\langle x'|\Delta p|\alpha\rangle$$

の要請が、実際に満たされていることを証明せよ。

［解答］

a. $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle$ とすると、

$$\langle\gamma|\gamma\rangle = (\langle\alpha| + \lambda^*\langle\beta|)\cdot(|\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle) \geq 0 \tag{1}$$

展開して

$$\langle\alpha|\alpha\rangle + \lambda^*\langle\beta|\alpha\rangle + \lambda\langle\alpha|\beta\rangle + |\lambda|^2\langle\beta|\beta\rangle \geq 0$$

ここで、

$$\lambda = -\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$$

とおくと、

$$\langle\alpha|\alpha\rangle - \frac{\langle\alpha|\beta\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\beta|\alpha\rangle - \frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}\langle\alpha|\beta\rangle + \frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle^2}\langle\beta|\beta\rangle \geq 0$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle - \frac{|\langle\alpha|\beta\rangle|^2}{\langle\beta|\beta\rangle} \geq 0$$

よって、**シュヴァルツの不等式**

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \tag{2}$$

を得る。

b. 一般化された不確定関係を導くために、観測量 X とケット $|\rangle$ にたいして平均値からのずれの演算子

$$\Delta X = X - \langle X\rangle$$

を定義する。そして

$$|\alpha\rangle = \Delta A|\rangle, \qquad |\beta\rangle = \Delta B|\rangle$$

とおいて、シュヴァルツの不等式 (2) に代入すると

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2 \tag{3}$$

を得る。また、

$$\langle\Delta A\Delta B\rangle = \underset{\text{純虚数}}{\tfrac{1}{2}\langle[A,B]\rangle} + \underset{\text{実数}}{\tfrac{1}{2}\langle\{A,B\}\rangle}$$

と表せるので、(教科書上巻 47 頁参照)

$$\begin{aligned} |\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2 &= \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{A,B\}\rangle \\ &\geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2 \end{aligned} \tag{4}$$

となる。式 (3) と式 (4) から、一般化された不確定関係

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$$

が得られる。

この一般化された不確定関係の等号が成り立つ条件は、式 (3) と式 (4) の等号が成り立つことである。

まず、式 (3) の等号が成り立つ条件は、式 (1) で

$$\begin{aligned}|\gamma\rangle &= |\alpha\rangle + \lambda|\beta\rangle = |\alpha\rangle - \frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}|\beta\rangle \\ &= 0\end{aligned}$$

であるから、

$$|\alpha\rangle = \frac{\langle\alpha|\beta\rangle^*}{\langle\beta|\beta\rangle}|\beta\rangle$$

あるいは、

$$\Delta A|\rangle = \frac{\langle\Delta A\ \Delta B\rangle^*}{\langle(\Delta B)^2\rangle}\Delta B|\rangle \tag{5}$$

である。

つぎに、式 (4) の等号が成り立つ条件は、

$$\langle\Delta A\Delta B\rangle = \frac{1}{2}\langle[A,B]\rangle = \text{純虚数} \tag{6}$$

である。

式 (6) を式 (5) に代入して、観測量の **分散** $\langle(\Delta B)^2\rangle$ が実数であることを考慮すれば、一般化された不確定関係の等号がなりたつのは、問題とする状態が

$$\Delta A|\rangle = \lambda\Delta B|\rangle$$

をみたし、λ が純虚数である場合であることが分かる。

c. まず、$\langle x'|p|\alpha\rangle$ を計算しよう。

$$\begin{aligned}\langle x'|p|\alpha\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}(2\pi d^2)^{-1/4}\exp\left[\frac{i\langle p\rangle x'}{\hbar} - \frac{(x'-\langle x\rangle)^2}{4d^2}\right] \\ &= -i\hbar\left(\frac{i\langle p\rangle}{\hbar} - \frac{2(x'-\langle x\rangle)}{4d^2}\right)(2\pi d^2)^{-1/4}\exp\left[\frac{i\langle p\rangle x'}{\hbar} - \frac{(x'-\langle x\rangle)^2}{4d^2}\right] \\ &= \left(\langle p\rangle + \frac{i\hbar(x'-\langle x\rangle)}{2d^2}\right)\langle x'|\alpha\rangle \qquad (7)\end{aligned}$$

したがって、

$$\begin{aligned}\langle x'|\Delta p|\alpha\rangle &= \langle x'|p-\langle p\rangle|\alpha\rangle \\ &= \langle x'|p|\alpha\rangle - \langle p\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle - \langle p\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \frac{i\hbar(x'-\langle x\rangle)}{2d^2}\langle x'|\alpha\rangle\end{aligned}$$

を得る。ただし、最後の式に変形するために式（7）を用いた。

一方、

$$\begin{aligned}\langle x'|\Delta x|\alpha\rangle &= \langle x'|x-\langle x\rangle|\alpha\rangle \\ &= (x'-\langle x\rangle)\langle x'|\alpha\rangle\end{aligned}$$

であるから、ガウス波束に対して、(b.) で示した条件と一致して

$$\langle x'|\Delta x|\alpha\rangle = \text{（純虚数）} \times \langle x'|\Delta p|\alpha\rangle$$

の要請が、実際に満たされていることが分かる。

問19

a. 期待値を S_z+ 状態に対してとり、

$$\langle(\Delta S_x)^2\rangle \equiv \langle S_x^2\rangle - \langle S_x\rangle^2$$

を計算せよ。この結果を用い、一般化された **不確定関係**

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$$

が、$A \to S_x$、$B \to S_y$ と置いて成り立つことを確かめよ。

b. S_x+ 状態に対して、$A \to S_x$、$B \to S_y$ とした不確定関係が成り立つことを確かめよ。

［解答］

a. 問8の結果を用いれば、

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta S_x)^2\rangle &= \langle+|S_x^2|+\rangle - \langle+|S_x|+\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \\
\langle(\Delta S_y)^2\rangle &= \langle+|S_y^2|+\rangle - \langle+|S_y|+\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \\
\frac{1}{4}|\langle[S_x,S_y]\rangle|^2 &= \frac{1}{4}|\langle+|i\hbar S_z|+\rangle|^2 = \frac{\hbar^4}{16}
\end{aligned}$$

よって、

$$\langle(\Delta S_x)^2\rangle\langle(\Delta S_y)^2\rangle = \frac{1}{4}|\langle[S_x,S_y]\rangle|^2$$

となって、一般化された不確定関係の等号が成り立つ。

b. 同様にして、S_x+ 状態に対して、

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta S_x)^2\rangle &= \langle S_x;+|S_x^2|S_x;+\rangle - \langle S_x;+|S_x|S_x;+\rangle^2 \\
&= \langle S_x;+|\frac{\hbar^2}{4}|S_x;+\rangle - \langle S_x;+|\frac{\hbar}{2}|S_x;+\rangle^2 \\
&= 0 \\
\frac{1}{4}|\langle[S_x,S_y]\rangle|^2 &= \frac{1}{4}|\langle S_x;+|i\hbar S_z|S_x;+\rangle|^2 = 0
\end{aligned}$$

よって、

$$\langle(\Delta S_x)^2\rangle\langle(\Delta S_y)^2\rangle = \frac{1}{4}|\langle[S_x,S_y]\rangle|^2$$

となって、一般化された不確定関係の等号が成り立つ。

問２０　**不確定積**

$$\langle(\Delta S_x)^2\rangle\langle(\Delta S_y)^2\rangle$$

を最大にする、$|+\rangle$ ケットと $|-\rangle$ ケットの線形結合を見いだせ。見つかった線形結合に対して、S_x と S_y の **不確定関係** が破られないことを実際に確かめよ。

［解答］　求めるケットを

$$|\alpha\rangle = \cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + e^{i\alpha}\sin\frac{\beta}{2}|-\rangle$$

とする。

$$\begin{aligned}
\langle\alpha|S_x^2|\alpha\rangle &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \\
\langle\alpha|S_x|\alpha\rangle &= \left(\cos\frac{\beta}{2}\langle+| + e^{-i\alpha}\sin\frac{\beta}{2}\langle-|\right) \times \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) \\
&\quad \times \left(\cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + e^{+i\alpha}\sin\frac{\beta}{2}|-\rangle\right) \\
&= \frac{\hbar}{2}\left(e^{+i\alpha}\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2} + e^{-i\alpha}\cos\frac{\beta}{2}\sin\frac{\beta}{2}\right) \\
&= \frac{\hbar}{2}\sin\beta\cos\alpha
\end{aligned}$$

よって、

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta S_x)^2\rangle &= \langle+|S_x^2|+\rangle - \langle+|S_x|+\rangle^2 \\
&= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\left(1 - \sin^2\beta\cos^2\alpha\right)
\end{aligned}$$

を得る。同様にして

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta S_y)^2\rangle &= \langle+|S_y^2|+\rangle - \langle+|S_y|+\rangle^2 \\
&= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\left(1 - \sin^2\beta\sin^2\alpha\right)
\end{aligned}$$

を得る。

　したがって、

$$\langle(\Delta S_x)^2\rangle\langle(\Delta S_y)^2\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^4\left(1 - \sin^2\beta + \frac{1}{4}\sin^4\beta\sin^2 2\alpha\right)$$

であるから、α = 任意, $\beta = 0, \pi$ で不確定積が最大になる。このときのケットは $|+\rangle$ または $|-\rangle$ である。

また、このとき

$$
\begin{aligned}
\langle\pm|(\Delta S_x)^2|\pm\rangle &= \frac{\hbar^2}{4}, \quad \langle\pm|(\Delta S_y)^2|\pm\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \\
\langle\pm|[S_x, S_y]|\pm\rangle &= \langle\pm|i\hbar S_z|\pm\rangle = \pm\frac{i\hbar^2}{2}
\end{aligned}
$$

となるから、一般化された不確定関係

$$
\langle(\Delta S_x)^2\rangle\langle(\Delta S_y)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[S_x, S_y]\rangle|^2
$$

の等号が成り立つ。

問21　2枚の堅い壁

$$V = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{それ以外} \end{cases}$$

に閉じ込められた1次元の粒子に対して、x-p の **不確定積** $\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle$ を計算せよ。 **基底状態** ならびに励起状態に関して計算せよ。

［解答］ 定常状態のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi}{dx^2} = E\phi(x)$$

を、境界条件

$$\phi(0) = \phi(a) = 0$$

のもとで解くと、規格化されたエネルギー固有関数

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \qquad (n\text{は正の整数})$$

を得る。したがって、

$$\begin{aligned}
\langle\phi_n|x|\phi_n\rangle &= \int_0^a dx\phi_n^*(x)x\phi_n(x) = \frac{a}{2} \\
\langle\phi_n|x^2|\phi_n\rangle &= \int_0^a dx\phi_n^*(x)x^2\phi_n(x) = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \\
\langle\phi_n|p|\phi_n\rangle &= \int_0^a dx\phi_n^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\phi_n(x) = 0 \\
\langle\phi_n|p^2|\phi_n\rangle &= \int_0^a dx\phi_n^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\phi_n(x) = \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2
\end{aligned}$$

より、不確定積は

$$\begin{aligned}
\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle &= (\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2)(\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2) \\
&= \left(\frac{n^2\pi^2}{12} - \frac{1}{2}\right)\hbar^2 > \frac{\hbar^2}{4}
\end{aligned}$$

となる。

問２２　ハイゼンベルクの不確定性原理 だけが制限であるとき、氷割りのきりが、きり先を下にしてつりあいが保てる時間を大雑把に見積れ。きり先はとがっていて、きり先ときり先を乗せている表面は堅いとせよ。結果の大きさの程度を大幅に変えないような近似を用いてよい。氷割りのきりの寸法と重さは、適当な値を仮定せよ。大体の数値を求め、答えを秒単位で表せ。

［解答］氷割りのきりを、仮に重心 G に全質量 M が集中した質点とみなして、問題を解こう。（厳密には正しくないが —）

きりの先端 O は固定点とし、$\overline{\mathrm{OG}} = l$、OG と鉛直線のなす角度を θ と置く。古典力学の運動方程式を援用すれば、$\theta \ll \pi$ に対して、

$$Ml^2 \frac{d^2\theta}{dt^2} = Mgl \sin\theta \approx Mgl\theta$$

だから、

$$\theta(t) = l\theta(0) \exp\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right)$$

を得る。重心 G の回転する円弧にそって x 座標をとり、共役な運動量を p とすると

$$\begin{aligned} x(t) &= l\theta(0) \exp\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right) \\ \frac{p(0)}{M} &= \dot{x}(0) = \sqrt{gl}\theta(0) \end{aligned}$$

であるから、

$$x(t) = \sqrt{\frac{l}{g}} \frac{1}{M} \exp\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right) p(0)$$

と書ける。したがって、

$$\begin{aligned} l^2[\theta(t), \theta(0)] &= [x(t), x(0)] = \sqrt{\frac{l}{g}} \frac{1}{M} \exp\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right) p(0), x(0)] \\ &= \frac{-i\hbar}{M} \sqrt{\frac{l}{g}} \frac{1}{M} \exp\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right) \end{aligned}$$

となるので、不確定関係

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle|$$

を用いると、

$$\langle(\Delta\theta)^2\rangle_t\langle(\Delta\theta)^2\rangle_{t=0} \geq= \frac{\hbar^2}{4M^2gl^3}\exp\left(2\sqrt{\frac{g}{l}}t\right)$$

となり、ガウス型波束に対しては等号が成立する。

$$\begin{aligned}\langle(\Delta\theta)^2\rangle_{t=0} &= \frac{\hbar}{2M\sqrt{gl^3}} \\ \sqrt{\langle(\Delta\theta)^2\rangle_t} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2M\sqrt{gl^3}}}\exp\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right)\end{aligned}$$

となる。この角度が 1 度になったとき、きりがつりあいからはずれたとみなすと、そのときの時間 t は、

$$\exp\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right) = \frac{\pi}{180}\sqrt{\frac{2M\sqrt{gl^3}}{\hbar}}$$

で与えられる。

$$\begin{aligned}l &= 20(\mathrm{cm}) \\ M &= 200(\mathrm{g}) \\ g &= 1000(\mathrm{cm}/s^2) \\ \hbar &= 1\times10^{-27}(\mathrm{erg\cdot s})\end{aligned}$$

とすると、$t = 3(s)$ となる。約 3 秒はつりあいが保てる。

問２３　３次元のケット空間を考える。基底ケットとしてある規格直交ケット（例えば $|1\rangle$、$|2\rangle$、$|3\rangle$）を用いたとき、演算子 A および B が、a,b を共に実数として

$$A \doteq \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \qquad B \doteq \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix},$$

で表現されている。

a. 明らかに A は **縮退** したスペクトルを示す。B もやはり縮退したスペクトルを示すであろうか。

b. A と B は交換することを示せ。

c. A と B の両方の同時固有ケットである、新しい規格直交ケットの組を見いだせ。その三つの固有ケットのそれぞれに対して、A と B の固有値を決定せよ。こうして得た固有値は、それぞれの固有ケットを完全に特徴づけるか。

［解答］

a.　演算子 B の固有方程式は、

$$\begin{vmatrix} b-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & -ib \\ 0 & ib & -\lambda \end{vmatrix} = -(\lambda-b)^2(\lambda+b) = 0$$

となって、演算子 B は縮退した固有値 $\lambda = b$ を持つ。

b.

$$\begin{aligned} & AB - BA \\ = & \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} - \\ & \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$
= \begin{pmatrix} ab & 0 & 0 \\ 0 & 0 & iab \\ 0 & -iab & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} ab & 0 & 0 \\ 0 & 0 & iab \\ 0 & -iab & 0 \end{pmatrix}
$$

$$
= \ 0
$$

c. 明らかにケット $|1\rangle$ は、A と B の同時固有ケットになっている。演算子 A の縮退した固有ケットは $|2\rangle$ と $|3\rangle$ であるから、同時固有ケットの残りの 2 つはこの二つのケットの線形結合である。

$$
\begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} 0 \\ C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}
$$

よって、固有方程式は

$$
\begin{vmatrix} -\lambda & -ib \\ ib & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - b^2 = 0
$$

となる。よって、固有ベクトルは、固有値 $\lambda = +b$ のとき

$$
\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}
$$

であり、固有値 $\lambda = -b$ のとき

$$
\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}
$$

である。

こうして得られた、新しいケットの組は、演算子 A と B の固有値で特徴づけられ

$$
\begin{aligned}
|a, b\rangle &= |1\rangle \\
|-a, b\rangle &= (|2\rangle + i|3\rangle)/\sqrt{2} \\
|-a, -b\rangle &= (i|2\rangle + |3\rangle)/\sqrt{2}
\end{aligned}
$$

で与えられる。

問２４
a. ２成分スピノルにかかる $(1/\sqrt{2})(1+i\sigma_x)$ は、x- 軸のまわりの角度 $(-\pi/2)$ の **回転演算子** の行列表現とみなせることを証明せよ。（マイナスの符号は回転が時計方向であることを示している。）

b. S_y の固有ケットを **基底** ベクトルとして用いて、S_z の行列表現を作れ。

［解答］
a. 問９の結果で $\alpha=\pi/2, \beta=\pi/2$ とおいて S_y の固有ケットが

$$|S_y;\pm\rangle = \pm\frac{1-i}{2}|+\rangle + \frac{1+i}{2}|-\rangle$$

と表されることを思いだそう。S_z の固有ケット $|+\rangle$、$|-\rangle$ を問題の演算子に作用させてみると、

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}(1+i\sigma_x)|+\rangle &= |S_y;+\rangle\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i\sigma_x)|-\rangle &= |S_y;-\rangle\end{aligned}$$

となって、z- 軸の正（負）方向を向いていたスピンが、y- 軸の正（負）方向を向いたスピンに変換される。これは、まさしく x- 軸のまわりの角度（$-\pi/2$）の回転である。

このことは、第３章でならう回転演算子をつかって

$$\mathcal{D}_x(\phi=-\frac{\pi}{2}) = \exp\left(\frac{-i\sigma_x(-\pi/2)}{2}\right) = \cos\frac{\pi}{2} + i\sigma_x\sin\frac{\pi}{2} = \frac{1+i\sigma_x}{\sqrt{2}}$$

と書けることからもわかる。

b. 行列要素を計算すると、

$$S_z \doteq \begin{pmatrix} \langle S_y;+|S_z|S_y;+\rangle = 0 & \langle Sy;+|S_z|S_y;-\rangle = i\frac{\hbar}{2} \\ \langle Sy;-|S_z|S_y;+\rangle = -i\frac{\hbar}{2} & \langle Sy;-|S_z|S_y;-\rangle = 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$$

を得る。

問２５　すべての 行列要素 $\langle b'|A|b''\rangle$ が、ある表示（この場合には $\{|b'\rangle\}$ の 基底 ）で実数であるとき、演算子が実演算子であると定義する場合がある。この定義は表示によらないのであろうか。すなわち、$\{|b'\rangle\}$ と異なるある基底を用いても、行列要素は依然として実数であろうか。よく知っている演算子 S_x および S_z （問題２４参照）あるいは、x および p_x を用いて、答が正しいことを確かめよ。

［解答］　実演算子の定義は、表示による。

演算子 S_z を $|S_z;\pm\rangle$ および $|S_y;\pm\rangle$ を基底にとって行列表示してみよう。前問の結果より

$$
\begin{aligned}
S_z &\doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad |S_z;\pm\rangle\text{基底} \\
S_z &\doteq \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad |S_y;\pm\rangle\text{基底}
\end{aligned}
$$

この場合、S_z が実演算子であるかどうかは、どちらの表示を用いるかによる。

今度は、演算子 x を $|x'\rangle$ および $|p'\rangle$ を基底にとって行列表示してみよう。問３３の a.(i) を参考にして、

$$
\begin{aligned}
\langle x'|x|x''\rangle &= x'\langle x'|x''\rangle = x'\delta(x'-x'') \\
\langle p'|x|p''\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|p''\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\delta(p'-p'')
\end{aligned}
$$

となる。この場合、x は x 表示では実演算子であるが、p 表示では実演算子でない。

最後に、演算子 p を $|x'\rangle$ および $|p'\rangle$ を基底にとって行列表示してみよう。教科書の式 (1.7.17-18) を参考にして、

$$
\begin{aligned}
\langle x'|p|x''\rangle &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|x''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'') \\
\langle p'|p|p''\rangle &= p'\langle p'|p''\rangle = p'\delta(p'-p'')
\end{aligned}
$$

となる。この場合、 運動量演算子 p は p 表示では実演算子であるが、x 表示では実演算子でない。

以上の例から、実演算子の定義は表示に依るといえる。

問２６　S_z を対角的にする 基底 と S_x を対角的にする二つの基底を結ぶ変換行列を作れ。答が一般的関係式

$$U = \sum_r |b^{(r)}\rangle\langle a^{(r)}|$$

と一致することを示せ。

［解答］　S_z を対角的にする基底を使って行列表示しよう。演算子

$$S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

を対角的にする基底は、明らかに

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

である。また、演算子

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

を対角的にする基底は、

$$|S_x;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |S_x;-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

である。よって、$|\pm\rangle$ を $|S_x;\pm\rangle$ に変換する変換行列 U は、

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = U\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = U$$

で与えられる。

一方、変換行列の一般式より

$$U = |S_x;+\rangle\langle+| \ + \ |S_x;-\rangle\langle-|$$

を得るが、これを行列表示すると

$$\begin{aligned} U \ &\doteq \ \begin{pmatrix} \langle+|S_x;+\rangle & \langle+|S_x;-\rangle \\ \langle-|S_x;+\rangle & \langle-|S_x;-\rangle \end{pmatrix} \\ &= \ \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となって、求めた結果と一致する。

問２７

a. $f(A)$ を、$A|a'\rangle = a'|a'\rangle$ の性質を持つ **エルミート演算子** A の関数と仮定する。a' **基底** から b' 基底への変換行列が分かっているとき、$\langle b''|f(A)|b'\rangle$ を計算せよ。

b. (a.) で得られた結果を類推して連続変数の場合に

$$\langle \boldsymbol{p}\,''|F(r)|\boldsymbol{p}\,'\rangle$$

を計算せよ。できるだけ簡単な表式で表せ。r は $\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ であり、x, y, z は演算子であることに注意せよ。

［解答］

a. 変換行列を U とすれば、$|b'\rangle = U|a'\rangle$ であるから

$$\begin{aligned}
&\langle b''|f(A)|b'\rangle \\
=\ & \sum_{a'''}\sum_{a''''}\langle b''|a'''\rangle\langle a'''|f(A)|a''''\rangle\langle a''''|b'\rangle \\
=\ & \sum_{a'''}\sum_{a''''}\langle a''|U^\dagger|a'''\rangle\langle a'''|f(A)|a''''\rangle\langle a''''|U|a'\rangle \\
=\ & \sum_{a'''}\sum_{a''''}\langle a''|U^\dagger|a'''\rangle f(a''')\delta_{a''',a''''}\langle a''''|U|a'\rangle \\
=\ & \sum_{a'''}\langle a''|U^\dagger|a'''\rangle f(a''')\langle a'''|U|a'\rangle
\end{aligned}$$

となる。行列表示では

$$f(A) \overset{|b\rangle}{=} U^\dagger \begin{pmatrix} f(a^{(1)}) & & \\ & \ddots & \\ & & f(a^{(N)}) \end{pmatrix} U$$

となる。

b. 変換関数

$$\langle \boldsymbol{x}\,'|\boldsymbol{p}\,'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i\boldsymbol{p}\,'\cdot\boldsymbol{x}\,'}{\hbar}\right)$$

を使って

$$
\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{p}" \,|F(r)|\boldsymbol{p}' \,\rangle \\
= &\int d^3x' \int d^3x'' \langle \boldsymbol{p}" \,|\boldsymbol{x}" \,\rangle\langle \boldsymbol{x}" \,|F(r)|\boldsymbol{x}' \,\rangle\langle \boldsymbol{x}' \,|\boldsymbol{p}' \,\rangle \\
= &\int d^3x' \int d^3x'' \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}" \,\cdot \boldsymbol{x}"}{\hbar}\right) F(r')\delta(\boldsymbol{x}' \,-\boldsymbol{x}" \,) \times \\
&\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{+i\boldsymbol{p}' \,\cdot \boldsymbol{x}'}{\hbar}\right) \\
= &\int d^3x' F(r') \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{+i(\boldsymbol{p}' \,-\boldsymbol{p}" \,)\cdot \boldsymbol{x}'}{\hbar}\right)
\end{aligned}
$$

ここで、極座標を用いれば角度について積分できる。

$$
\begin{aligned}
= &\int_0^\infty r'^2 dr' \int_{-1}^1 d\cos\theta \int_0^{2\pi} d\phi F(r') \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \exp\left(\frac{+i|\boldsymbol{p}' \,-\boldsymbol{p}" \,|r'\cos\theta}{\hbar}\right) \\
= &\frac{2\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty r'^2 dr' F(r') \frac{\hbar}{i|\boldsymbol{p}' \,-\boldsymbol{p}" \,|r'} \times \\
&\left[\exp\left(\frac{+i|\boldsymbol{p}' \,-\boldsymbol{p}" \,|r'}{\hbar}\right) - \exp\left(\frac{-i|\boldsymbol{p}' \,-\boldsymbol{p}" \,|r'}{\hbar}\right)\right] \\
= &\frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty r'^2 dr' F(r') \frac{\sin\left(\frac{|\boldsymbol{p}' \,-\boldsymbol{p}" \,|r'}{\hbar}\right)}{\frac{|\boldsymbol{p}' \,-\boldsymbol{p}" \,|r'}{\hbar}}
\end{aligned}
$$

問２８
a. x と p_x を１次元の位置座標と運動量とする。古典的な **ポアッソンの括弧式** $[x, F(p_x)]_{古典的}$ を計算せよ。

b. 今度は x と p_x を対応する量子力学的演算子とする。 **交換関係** $\left[x, \exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)\right]$ を計算せよ。

c. (b) で得られた結果を用いて、

$$\exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)|x'\rangle, \quad (x|x'\rangle = x'|x'\rangle)$$

が位置座標演算子 x の固有状態であることを証明せよ。対応する固有値はいくらか。

［解答］

a.

$$[x, F(p_x)]_{古典的} = \frac{\partial x}{\partial x}\frac{\partial F(p_x)}{\partial p_x} - \frac{\partial x}{\partial p_x}\frac{\partial F(p_x)}{\partial x} = \frac{dF(p_x)}{dp_x}$$

b. 問２９の結果を用いると、

$$\left[x, \exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)\right] = i\hbar\frac{d}{dp_x}\exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right) = -a\exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)$$

c. 与えられたケットに、位置演算子 x を作用させてみる。

$$\begin{aligned} x\exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)|x'\rangle &= \left(\left[x, \exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)\right] + \exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)x\right)|x'\rangle \\ &= -a\exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)|x'\rangle + \exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)x'|x'\rangle \\ &= (x'-a)\exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)|x'\rangle \end{aligned}$$

問題のケットは、演算子 x の固有ケットであり、固有値は $(x'-a)$ である。したがって、演算子 $\exp\left(\frac{ip_xa}{\hbar}\right)$ は、ケットを $(-a)$ だけ平行移動させる演算子である。

問29

a. Gottfried (1966) の247ページには

$$[x_i, G(\boldsymbol{p}\ )] = i\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i}, \quad [p_i, F(\boldsymbol{x}\ )] = -i\hbar\frac{\partial F}{\partial x_i}$$

が **基本的な交換関係** から「容易に導ける」と書いてある。ここで、F,G はそれぞれの変数の級数で表される任意の関数であるとする。このことを確かめよ。

b. $[x^2, p^2]$ を計算せよ。その結果を古典的なポアソンかっこ式 $[x^2, p^2]_{古典的}$ と比較せよ。

［解答］

a. まず、数学的帰納法によって

$$[x_i, p_j^n] = i\hbar n p_j^{n-1}\delta_{ij} = i\hbar\frac{dp_j^n}{dp_j}\delta_{ij} \tag{1}$$

を示そう。

n=1 のとき 基本的交換関係から $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ が成り立つ。

n のとき $[x_i, p_j^n] = i\hbar n p_j^{n-1}\delta_{ij}$ が成り立つと仮定する。$n+1$ では、

$$\begin{aligned}
[x_i, p_j^{n+1}] &= p_j[x_i, p_j^n] + [x_i, p_j]p_j^n \\
&= p_j i\hbar n p_j^{n-1}\delta_{ij} + i\hbar p_j^n\delta_{ij} \\
&= i\hbar(n+1)p_j^n\delta_{ij}
\end{aligned}$$

となって、$n+1$ でも成り立つ。よって、すべての自然数 n について式 (1) が成り立つ。

任意の関数 $G(\boldsymbol{p}\ )$ は、p_i の級数に展開されるので、

$$\begin{aligned}
[x_i, G(\boldsymbol{p}\ )] &= [x_i, \sum_n g_n p_i^n] = \sum_n g_n[x_i, p_i^n] \\
&= \sum_n g_n i\hbar n p_i^{n-1} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\sum_n g_n p_i^n \\
&= i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}G(\boldsymbol{p}\ )
\end{aligned}$$

が証明される。ただし、上の式で $p_{j\neq i}$ は x_i と交換するので普通の数と同じように係数 g_n に含めて考えた。

問題の第 2 式についても、基本的交換関係 $[p_i, x_j] = -i\hbar\delta_{ij}$ をつかって同様に証明できる。

b.

$$\begin{aligned} [x^2, p^2] &= x[x, p^2] + [x, p^2]x = xi\hbar\frac{dp^2}{dp} + i\hbar\frac{dp^2}{dp}x \\ &= 2i\hbar(xp + px) \\ [x^2, p^2]_{\text{古典的}} &= \frac{\partial x^2}{\partial x}\frac{\partial p^2}{\partial p} - \frac{\partial x^2}{\partial p}\frac{\partial p^2}{\partial x} = 4xp \\ &= 2(xp + px) \end{aligned}$$

古典論の **ポアッソンの括弧式** と量子論の交換関係を比較すると、x と p が交換可能か不可能かが異なる。また、係数の $i\hbar$ もことなる。

問３０　有限の（空間的）変位を行う **平行移動演算子** は、$\boldsymbol{p}$ を **運動量演算子** として

$$\mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,) = \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\ \cdot \boldsymbol{l}}{\hbar}\right)$$

で与えられる。

a. 交換関係

$$[x_i, \mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)]$$

を計算せよ。

b. (a.) または他の式を用いて、期待値 $\langle \boldsymbol{x}\,\rangle$ が平行移動によりどのように変化するかを示せ。

［解答］　問２９の結果を用いて

$$\begin{aligned}
[x_i, \mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)] &= i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\ \cdot \boldsymbol{l}}{\hbar}\right) \\
&= l_i \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\ \cdot \boldsymbol{l}}{\hbar}\right) \\
&= l_i\mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)
\end{aligned}$$

b.

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{x}\,\rangle_{\text{平行移動後}} &= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(\boldsymbol{l}\,)\boldsymbol{x}\ \mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(\boldsymbol{l}\,)(\ [\boldsymbol{x}\ , \mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)] + \mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)\boldsymbol{x}\ )\,|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(\boldsymbol{l}\,)(\boldsymbol{l}\ \mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,) + \mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)\boldsymbol{x}\ )\,|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(\boldsymbol{l}\,)\mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,)(\boldsymbol{l}\ + \boldsymbol{x}\ )\,|\alpha\rangle \\
&= \langle \boldsymbol{x}\,\rangle + \boldsymbol{l}
\end{aligned}$$

となって、期待値 $\langle \boldsymbol{x}\,\rangle$ は、$\boldsymbol{l}$ だけ変化する。ただし、**平行移動演算子** の性質

$$\mathcal{T}^\dagger(\boldsymbol{l}\,)\mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,) = \mathcal{T}(-\boldsymbol{l}\,)\mathcal{T}(\boldsymbol{l}\,) = 1$$

を使った。

問３１　本文では、$\mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')$ の、位置ならびに運動量固有ケットに対する効果、およびさらに一般的な状態ケット $|\alpha\rangle$ に対する効果を議論した。
無限小平行移動 のもとでの期待値 $\langle \boldsymbol{x} \rangle$ $\langle \boldsymbol{p} \rangle$ のふるまいも調べることができる。教科書の式 (1.6.25,45) の **交換関係**

$$[x, \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')] = d\boldsymbol{x}', \quad [\boldsymbol{p}, \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')] = 0$$

および $|\alpha\rangle \to \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha\rangle$ のみを用いて、無限小平行移動の結果、
$\langle \boldsymbol{x} \rangle \to \langle \boldsymbol{x} \rangle + d\boldsymbol{x}'$, $\langle \boldsymbol{p} \rangle \to \langle \boldsymbol{p} \rangle$ となることを示せ。

［解答］式 (1.6.25) より、

$$[\boldsymbol{x}, \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')] = d\boldsymbol{x}'$$

であるから、$d\boldsymbol{x}'$ の 2 次以上の項を無視して

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{x} \rangle_{\text{平行移動後}} &= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')\boldsymbol{x}\,\mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')(\,[\boldsymbol{x}, \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')] + \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')\boldsymbol{x}\,)|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')(d\boldsymbol{x}' + \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')\boldsymbol{x}\,)|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')\mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')(d\boldsymbol{x}' + \boldsymbol{x}\,)|\alpha\rangle \\
&= \langle \boldsymbol{x} \rangle + d\boldsymbol{x}'
\end{aligned}$$

となって、期待値 $\langle \boldsymbol{x} \rangle$ は、$d\boldsymbol{x}'$ だけ変化する。ただし、無限小平行移動演算子の性質

$$\mathcal{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')\mathcal{T}(d\boldsymbol{x}') = \mathcal{T}(-d\boldsymbol{x}')\mathcal{T}(d\boldsymbol{x}') = 1 + O(dx'^2)$$

を使った。
　次に、式 (1.6.45) より、

$$[\boldsymbol{p}, \mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')] = 0$$

であるから、

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{p} \rangle_{\text{平行移動後}} &= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')\boldsymbol{p}\,\mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')|\alpha\rangle \\
&= \langle\alpha|\mathcal{T}^\dagger(d\boldsymbol{x}')\mathcal{T}(d\boldsymbol{x}')\boldsymbol{p}\,|\alpha\rangle \\
&= \langle \boldsymbol{p} \rangle
\end{aligned}$$

となって、期待値 $\langle \boldsymbol{p} \rangle$ は変化しない。

問3 2

a. ガウスの波束

$$\langle x'|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}}\exp\left(ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right)$$

に対して、p と p^2 の期待値が

$$\langle p\rangle = \hbar k, \quad \langle p^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2$$

になることを確かめよ。

b. 運動量空間の波動関数 (1.7.42) を用いて、p と p^2 の期待値を計算せよ。

［解答］

a.

$$\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \langle\alpha|p|\alpha\rangle \\
&= \int dx' \frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}}\exp\left[-ikx - \frac{x'^2}{2d^2}\right] \times \\
&\quad \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}}\exp\left[+ikx - \frac{x'^2}{2d^2}\right] \\
&= \frac{1}{\pi^{1/2}d}\int dx'\left(\hbar k + i\hbar\frac{x'}{d^2}\right)\exp\left[-\frac{x'^2}{d^2}\right] \\
&= \frac{\hbar k}{\pi^{1/2}d}\int dx' \exp\left[-\frac{x'^2}{d^2}\right] + \frac{i\hbar}{\pi^{1/2}d}\int dx'\frac{x'}{d^2}\exp\left[-\frac{x'^2}{d^2}\right] \\
&= \frac{\hbar k}{\pi^{1/2}d}\sqrt{d^2\pi} + 0 \\
&= \hbar k
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle p^2\rangle &= \langle\alpha|p^2|\alpha\rangle \\
&= \int dx' \frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}}\exp\left[-ikx - \frac{x'^2}{2d^2}\right] \times \\
&\quad \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)^2\frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}}\exp\left[+ikx - \frac{x'^2}{2d^2}\right]
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{\pi^{1/2}d}\int dx'\left(-\frac{1}{d^2}-k^2-\frac{2ik}{d^2}x'+\frac{x'^2}{d^4}\right)\exp\left[-\frac{x'^2}{d^2}\right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{\pi^{1/2}d}\left[-\left(\frac{1}{d^2}+k^2\right)\sqrt{\pi d^2}+\frac{1}{d^4}\frac{d^2}{2}\sqrt{\pi d^2}\right] \\
&= \frac{\hbar^2}{2d^2}+\hbar^2k^2
\end{aligned}
$$

b. (1.7.42) より、

$$
\langle p'|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}}\exp\left[-\frac{(p'-\hbar k)^2d^2}{2\hbar^2}\right]
$$

だから、$p''=p'-\hbar k$ とおけば、

$$
\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int dp'p'|\langle p'|\alpha\rangle|^2 \\
&= \int dp'p'\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{(p'-\hbar k)^2d^2}{\hbar^2}\right] \\
&= \int dp''(p''+\hbar k)\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{p''^2d^2}{\hbar^2}\right] \\
&= \int dp''p''\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{p''^2d^2}{\hbar^2}\right]+\hbar k\int dp''\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{p''^2d^2}{\hbar^2}\right] \\
&= 0+\hbar k=\hbar k \\
\langle p^2\rangle &= \int dp'p'^2|\langle p'|\alpha\rangle|^2 \\
&= \int dp'p'^2\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{(p'-\hbar k)^2d^2}{\hbar^2}\right] \\
&= \int dp''(p''+\hbar k)^2\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{p''^2d^2}{\hbar^2}\right] \\
&= \int dp''(p''^2+2p''\hbar k+\hbar^2k^2)\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\exp\left[-\frac{p''^2d^2}{\hbar^2}\right] \\
&= \frac{\hbar^2}{2d^2}+\hbar^2k^2
\end{aligned}
$$

となる。

問３３

a. 次式を証明せよ。

$$(i)\quad \langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\alpha\rangle$$

$$(ii)\quad \langle \beta|x|\alpha\rangle = \int dp'\phi_\beta^*(p')i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\phi_\alpha(p')$$

ここで、$\phi_\alpha(p')=\langle p'|\alpha\rangle$ および $\phi_\beta(p')=\langle p'|\beta\rangle$ は **運動量空間の波動関数** である。

b. x を位置演算子、Ξ を運動量の次元を持つある数とするとき

$$\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)$$

の持つ物理的意味は何か。理由をつけて答えよ。

［解答］

a.(i)

$$\begin{aligned}
\langle p'|x|\alpha\rangle &= \int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|x|\alpha\rangle \\
&= \int dx'x'\langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\
&= \int dx'x'\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right)\langle x'|\alpha\rangle \\
&= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)\int dx'\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right)\langle x'|\alpha\rangle \\
&= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)\int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\
&= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\right)\langle p'|\alpha\rangle
\end{aligned}$$

(ii)

$$\begin{aligned}
\langle \beta|x|\alpha\rangle &= \int dp'\langle \beta|p'\rangle\langle p'|x|\alpha\rangle \\
&= \int dp'\langle \beta|p'\rangle i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\alpha\rangle
\end{aligned}$$

$$= \int dp' \phi_\beta^*(p') i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$$

b. 問題の演算子を運動量の固有状態 $|p'\rangle$ に作用させてみよう。問２９の結果を使えば、

$$\begin{aligned}
& p \exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)|p'\rangle \\
= & \left(\left[p, \exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)\right] + \exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)p\right)|p'\rangle \\
= & \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right) + \exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)p'\right)|p'\rangle \\
= & \left(\Xi \exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right) + \exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)p'\right)|p'\rangle \\
= & (\Xi + p')\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)|p'\rangle
\end{aligned}$$

となって、$\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)|p'\rangle$ は、固有値 $(p'+\Xi)$ を持った運動量の固有状態になっている。

したがって、演算子 $\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)$ は、**運動量を Ξ だけ増加させる演算子** である。

【Q & A】

Q： **連続スペクトル** のブラとケットの次元は何か？

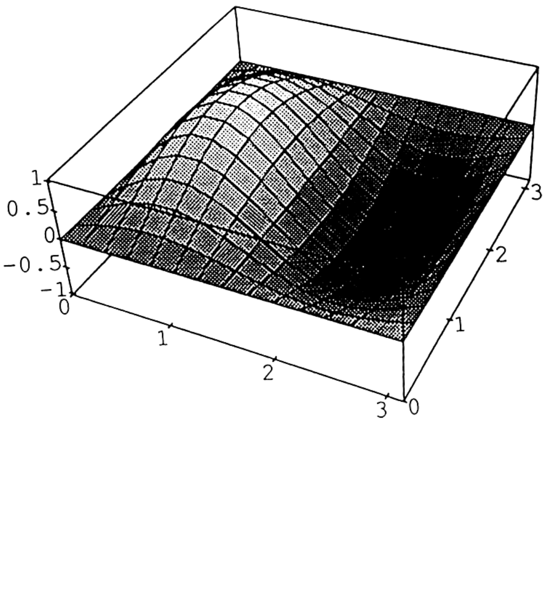
A：位置演算子 x の固有ブラとケットは

$$\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'') \quad (\text{［長さ］}^{-1}\text{ の次元})$$

のように **規格化** されているので、ブラもケットも［長さ］$^{-1/2}$ の次元をもつと考えられる。このことは、たとえば、離散的スペクトルをもつケットが $|\alpha\rangle$ で与えられたとき、連続スペクトルをもつ **観測量** （たとえば粒子の位置 x）を観測して粒子がある狭い領域 $(x'-dx'/2, x'+dx'/2)$ に見いだされる確率（無次元）が $|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx'$ で与えられるという量子力学の **確率の仮定** ともつじつまがあう。同様にして、 **運動量演算子** p の固有ケットならば［運動量］$^{-1/2}$ の次元をもつ。

第 2 章

量子ダイナミックス



問 1　本文で議論した **スピンの歳差運動** の問題を考える。これは **ハイゼンベルク表示** によっても解くことができる。ハミルトニアン

$$H = -\left(\frac{eB}{mc}\right) S_z = \omega S_z$$

を用いて、時間に依存する演算子 $S_x(t), S_y(t)$ および $S_z(t)$ に対する **ハイゼンベルクの運動方程式** を書け。これらの方程式を解いて、$S_{x,y,z}$ を時間の関数として求めよ。

［解答］ **シュレーディンガー表示** の演算子を $S_x, S_y, S_z, \cdots$、ハイゼンベルク表示の演算子を $S_x(t), S_y(t), S_z(t), \cdots$ と表すことにする。ハイゼンベルクの方程式は、

$$\frac{dS_z(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[S_z(t), H] = \frac{1}{i\hbar}[S_z(t), \omega S_z] = 0$$

よって

$$S_z(t) = S_z \tag{1}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dS_x(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[S_x(t), H] \\
&= \frac{1}{i\hbar}[S_x(t), \omega S_z] \\
&= \frac{1}{i\hbar}[S_x(t), \omega S_z(t)] \\
&= -\omega S_y(t) \qquad (2) \\
\frac{dS_y(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[S_y(t), \omega S_z] \\
&= \frac{\omega}{i\hbar}[S_y(t), S_z(t)] \\
&= \omega S_x(t) \qquad (3)
\end{aligned}$$

と書ける。式 (2) と式 (3) から $S_y(t)$ を消去すると、$S_x(t)$ に関する 2 階の微分方程式

$$\frac{d^2 S_x(t)}{dt^2} = -\omega \frac{dS_y(t)}{dt} = -\omega^2 S_x(t)$$

を得る。この微分方程式の一般解は

$$S_x(t) = C_1 \cos(\omega t) + C_2 \sin(\omega t)$$

となるが、時刻 $t = 0$ でハイゼンベルク表示とシュレーディンガー表示が一致することを要請すれば

$$
\begin{aligned}
S_x(t=0) &= C_1 \equiv S_x \\
\frac{dS_x}{dt}(t=0) &= -\omega S_y(t=0) = -\omega C_2 \equiv -\omega S_y
\end{aligned}
$$

となるので、

$$S_x(t) = S_x \cos(\omega t) - S_y \sin(\omega t)$$

をえる。同様にして、

$$S_y(t) = S_x \sin(\omega t) + S_y \cos(\omega t)$$

となる。

問2　第1章の問題11のハミルトニアンを、もう1度検討しよう。タイピストが、誤って H を

$$H = H_{11}|1\rangle\langle 1| + H_{22}|2\rangle\langle 2| + H_{12}|1\rangle\langle 2|$$

と書いたとしよう。これは何の原理に抵触しているか。このような正しくないハミルトニアンを用いて、時間に依存する問題を最も一般的に解こうとするとき、生じる具体的な問題を説明せよ。
（簡単のために $H_{11} = H_{22} = 0$ と仮定してよい。）

［解答］簡単のために $H_{11} = H_{22} = 0$ と仮定して、ハミルトニアンを行列表示すると

$$H \doteq \begin{pmatrix} 0 & H_{12} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。

ハミルトニアンが **エルミート演算子** でないので、 **時間発展演算子** が **ユニタリー演算子** にならなくなる。すなわち、 **確率の保存則** が破れる。

実際、 $H^2 = 0$ になることに注意して時間発展演算子を計算すると

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp(-iHt/\hbar) \\ &= 1 - iHt/\hbar = \begin{pmatrix} 1 & -iH_{12}t/\hbar \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ U^\dagger(t) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ +iH_{12}t/\hbar & 1 \end{pmatrix} \\ U(t)U^\dagger(t) &= \begin{pmatrix} 1 & -iH_{12}t/\hbar \\ +iH_{12}t/\hbar & 1 + H_{12}^2t^2/\hbar^2 \end{pmatrix} \\ &\neq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となって、ユニタリー演算子にならない。

問 3　一個の電子が、z- 軸の正方向の強さ B の一様な定常的磁場中にあるとする。この電子は $t=0$ で、固有値 $(\hbar/2)$ を持つ $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}$ の固有状態にあった。ここで、$\boldsymbol{n}$ は単位ベクトルで、xz- 平面内にあり z- 軸と β の角度をなしている。
a. 電子を $S_x=\hbar/2$ の状態に見いだす確率を時間の関数として求めよ。

b. S_x の期待値を時間の関数として求めよ。

c. 確認のために極端な場合、(i)$\beta\to 0$、および (ii)$\beta\to\pi/2$ に物理的に意味のある答えになっていることを示せ。

［解答］
a. 始状態を

$$|\alpha;t=0\rangle=\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)|+\rangle+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)|-\rangle$$

終状態を

$$|S_x=+\hbar/2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

とおき、ハミルトニアンが

$$H=-\frac{eB}{m_ec}S_z=\omega S_z \qquad (e<0)$$

と書けることを考慮すれば、時刻 t における状態ケットは

$$\begin{aligned}|\alpha;t\rangle &= \exp\left(-\frac{i\omega S_zt}{\hbar}\right)\left[\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)|+\rangle+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)|-\rangle\right]\\ &= \cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)|+\rangle+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)|-\rangle\end{aligned}$$

となるので、電子を $S_x=+\hbar/2$ に見いだす確率は

$$\begin{aligned}&P(S_x=+\hbar/2;t)=|\langle S_x=+(\hbar/2)|\alpha,t\rangle|^2\\ &= \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)+\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)\right|^2\\ &= \frac{1}{2}\left(\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)\right)\\ &\quad\times\left(\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{i\omega t}{2}\right)+\sin\left(\frac{\beta}{2}\right)\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)\right)\\ &= \frac{1}{2}(1+\sin\beta\cos\omega t)\end{aligned}$$

となる。

b.

$$
\begin{aligned}
\langle S_x \rangle &= \langle \alpha; t | \left(\frac{\hbar}{2} \{ |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +| \right) |\alpha; t\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2} \left\{ \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \exp(i\omega t) + \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \exp(-i\omega t) \right\} \\
&= \frac{\hbar}{2} \sin\beta \cos\omega t
\end{aligned}
$$

【別解】 $S_x = -(\hbar/2)$ の状態に見いだす確率は

$$
P_- = 1 - P_+ = \frac{1}{2}(1 - \sin\beta\cos\omega t)
$$

よって

$$
\begin{aligned}
\langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{4}(1 + \sin\beta\cos\omega t) - \frac{\hbar}{4}(1 - \sin\beta\cos\omega t) \\
&= \frac{\hbar}{2} \sin\beta \cos\omega t
\end{aligned}
$$

c. 1. $\beta \to 0$ のとき $S_z = +\hbar/2$ の固有状態なので、$P(S_x = +\hbar/2) = 1/2$ となり $\langle S_x \rangle = 0$ である。

2. $\beta \to \pi/2$ のとき $S_x = +\hbar/2$ の固有状態なので、$P(S_x = +\hbar/2) = (1 + \cos\omega t)/2$ となり $\langle S_x \rangle = (\hbar/2)\cos\omega t$ である。これは、xy 平面内での歳差運動をあらわす。

問4　1次元の **自由粒子** の位置座標演算子を、**ハイゼンベルク表示** で $x(t)$ とする。

$$[x(t), x(0)]$$

を計算せよ。

［解答］

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} \text{より} \\ \frac{dx(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[x(t), \frac{p^2}{2m}] = \frac{1}{i\hbar}[x(t), \frac{p(t)^2}{2m}] \\ &= \frac{1}{i\hbar} i\hbar \frac{\partial}{\partial p(t)} \frac{p(t)^2}{2m} = \frac{p(t)}{m} \\ \frac{dp(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[p(t), \frac{p^2}{2m}] = \frac{1}{i\hbar}[p(t), \frac{p(t)^2}{2m}] = 0 \end{aligned}$$

よって

$$x(t) = \frac{p(0)}{m} t + x(0)$$

$$[x(t), x(0)] = [\frac{p(0)}{m} t + x(0), x(0)] = -\frac{i\hbar t}{m}$$

問5　ハミルトニアンが

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

で与えられる1次元の1粒子を考える。$[[H, x], x]$ を計算することにより

$$\sum_{a'} |\langle a''|x|a'\rangle|^2 (E_{a'} - E_{a''}) = \frac{\hbar^2}{2m} \tag{1}$$

である事を証明せよ。ここで $|a'\rangle$ は固有値 $E_{a'}$ のエネルギーの固有ケットである。

［解答］交換関係

$$\begin{aligned} &[[H, x], x] \\ &= \left[\left[\frac{p^2}{2m} + V(x), x\right], x\right] = \left[\left[\frac{p^2}{2m}, x\right], x\right] = \left[-i\hbar\frac{p}{m}, x\right] = -\frac{\hbar^2}{m} \end{aligned}$$

より、

$$\langle a''|[[H, x], x]|a''\rangle = -\frac{\hbar^2}{m} \tag{2}$$

を得る。一方、

$$\begin{aligned} &\langle a''|[[H, x], x]|a''\rangle \\ &= \langle a''|[H, x]x|a''\rangle - \langle a''|x[H, x]|a''\rangle \\ &= \sum_{a'} (\langle a''|[H, x]|a'\rangle\langle a'|x|a''\rangle - \langle a''|x|a'\rangle\langle a'|[H, x]|a''\rangle) \\ &= \sum_{a'} ((E_{a''} - E_{a'})\langle a''|x|a'\rangle\langle a'|x|a''\rangle - \langle a''|x|a'\rangle(E_{a'} - E_{a''})\langle a'|x|a''\rangle) \\ &= -2\sum_{a'} (E_{a'} - E_{a''})|\langle a''|x|a'\rangle|^2 \end{aligned} \tag{3}$$

であるから、式(2)と式(3)より式(1)を得る。

振動子強度 f_{ni} を

$$f_{ni} \equiv \frac{2m\omega_{ni}}{\hbar}|\langle n|x|i\rangle|^2$$

で定義すれば、式(1)より、Thomas-Reiche-Kuhn の総和則 $\sum_n f_{ni} = 1$ が導かれる。

問 6　ハミルトニアンが $H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{x})$ で与えられる 3 次元空間内の 1 粒子を考察する。$[\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}, H]$ を計算することによって、

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\rangle = \langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}\rangle - \langle\boldsymbol{x}\cdot\nabla V\rangle$$

を示せ。上の関係式が **ビリアル定理** の量子力学的類似式であると同定するには、左辺が 0 になることが重要である。このようなことが起こるのは、どのような場合か。

［解答］ $i, j = x, y, z$ として

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}, H] &= [\sum_i x_i p_i, \frac{1}{2m}\sum_j p_j^2 + V(\boldsymbol{x})] \\
&= \sum_i([x_i p_i, \frac{1}{2m}\sum_j p_j^2] + [x_i p_i, V(\boldsymbol{x})]) \\
&= \sum_i([x_i, \frac{1}{2m}\sum_j p_j^2]p_i + x_i[p_i, V(\boldsymbol{x})]) \\
&= i\hbar\sum_i(\frac{p_i^2}{m} - x_i\frac{\partial V(\boldsymbol{x})}{\partial x_i})
\end{aligned}$$

であるから、

$$\frac{d}{dt}(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}) = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}, H] = \frac{\boldsymbol{p}^2}{m} - \boldsymbol{x}\cdot\nabla V(\boldsymbol{x})$$

となる。ブラケットで挟んで、

$$\frac{d}{dt}\langle \boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}\rangle = \langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}\rangle - \langle\boldsymbol{x}\cdot\nabla V(\boldsymbol{x})\rangle$$

を得る。

例えば、エネルギー固有状態を選べば、

$$\begin{aligned}
\langle a|(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^H|a\rangle &= \langle a|\left(\exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^S\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)\right)|a\rangle \\
&= \exp\left(\frac{iE_a t}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iE_a t}{\hbar}\right)\langle a|((\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^S)|a\rangle \\
&= \langle a|((\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^S)|a\rangle
\end{aligned}$$

で、$\langle a|((\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p})^S)|a\rangle$ は、時間によらないので、左辺 $= 0$ となる。ただし、添字の H, S は **ハイゼンベルク表示** およびシュレーディンガー表示の演算子を示す。

問7　1次元空間内の **自由粒子** の **波束** を考える。これは、$t=0$で **最小不確定関係**

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad (t=0)$$

を満たしている。さらに、

$$\langle x\rangle = \langle p\rangle = 0 \quad (t=0)$$

である事も分かっている。$\langle(\Delta x)^2\rangle_{t=0}$ が与えられたとき、**ハイゼンベルク表示** を用い、$\langle(\Delta x)^2\rangle_t$ を $t(t\geq 0$ の関数として求めよ。（ヒント：第１章の問題１８で調べた、最小不確定関係を満たす波束の性質を利用せよ。）

［解答］

$$\begin{aligned}
x(t) &= \frac{p}{m}t + x \\
p(t) &= p \\
(\Delta x)^2(t) &= (x(t) - \langle x\rangle_t)^2 \\
&= x^2(t) - 2\langle x\rangle_t x(t) + \langle x\rangle_t^2 \\
\langle(\Delta x)^2\rangle_t &= \langle(\Delta x)^2(t)\rangle \\
&= \langle x^2(t) - 2\langle x\rangle_t x(t) + \langle x\rangle_t^2\rangle \\
&= \langle x(t)^2\rangle - \langle x(t)\rangle^2 \\
&= \langle(\frac{p}{m}t + x)^2\rangle - \langle\frac{p}{m}t + x\rangle^2 \\
&= \langle\frac{p^2}{m^2}t^2\rangle + \langle x^2\rangle \\
&= \frac{t^2}{m^2}\langle(\Delta p)^2\rangle + \langle(\Delta x)^2\rangle \\
&= \langle(\Delta x^2)\rangle_{t=0} + \frac{\hbar^2}{4m^2\langle(\Delta x)^2\rangle_{t=0}}t^2
\end{aligned}$$

問 8　$|a'\rangle$ と $|a''\rangle$ をエルミート演算子の固有状態とし、それぞれの固有関数を $a', a''(a' \neq a'')$ とする。**ハミルトン演算子** は、δ を実数として

$$H = |a'\rangle\delta\langle a''| + |a''\rangle\delta\langle a'|$$

で与えられている。

a. 明らかに、$|a'\rangle, |a''\rangle$ はハミルトニアンの固有状態ではない。ハミルトニアンの固有状態を書き下せ。エネルギー固有値はいくらか。

b. 系が $t = 0$ で、状態 $|a'\rangle$ にあったとする。状態ベクトルを $t > 0$ に対し、シュレーディンガー表示で表せ。

c. 系が $t = 0$ で、状態 $|a'\rangle$ にあったとすると、$t > 0$ で、系を $|a''\rangle$ の状態に見いだす確率はいくらか。

d. この問題に対応する物理的状況を考えることができるか。

［解答］

a. 状態 $|a'\rangle$ と $|a''\rangle$ を基底としてハミルトニアンを行列表示すると

$$H \doteq \begin{pmatrix} 0 & \delta \\ \delta & 0 \end{pmatrix} = \delta\sigma_x$$

となる。したがって、固有方程式

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \delta \\ \delta & -\lambda \end{vmatrix} = 0$$

より、エネルギー固有値

$$\lambda = \pm\delta$$

を得る。対応する規格化したエネルギー固有ケットは

$$\begin{aligned} |+\delta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|a'\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|a''\rangle \\ |-\delta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|a'\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|a''\rangle \end{aligned}$$

となる。

b. 状態 $|a'\rangle$ をエネルギー固有ケットに分解すると

$$|a'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\delta\rangle + |-\delta\rangle)$$

となるので

$$\begin{aligned}
|a';t\rangle &= \exp(\frac{-iHt}{\hbar})|a'\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(\exp(\frac{-i\delta t}{\hbar})|+\delta\rangle + \exp(\frac{+i\delta t}{\hbar})|-\delta\rangle) \\
&= \frac{1}{2}(\exp(\frac{-i\delta t}{\hbar}) + \exp(\frac{+i\delta t}{\hbar}))|a'\rangle + \frac{1}{2}(\exp(\frac{-i\delta t}{\hbar}) - \exp(\frac{+i\delta t}{\hbar}))|a''\rangle \\
&= \cos\left(\frac{\delta t}{\hbar}\right)|a'\rangle - i\sin\left(\frac{\delta t}{\hbar}\right)|a''\rangle
\end{aligned}$$

c.

$$|\langle a''|U(t,0)|a'\rangle|^2 = \left|-i\sin\left(\frac{\delta t}{\hbar}\right)\right|^2 = \sin^2\left(\frac{\delta t}{\hbar}\right)$$

d. エルミート演算子として S_z を選んで

$$|a'\rangle = |+\rangle, \quad |a''\rangle = |-\rangle$$

とすれば、

$$H = \frac{2\delta}{\hbar}S_x = -\frac{eB}{mc}S_x$$

および

$$|+\delta\rangle = |S_x;+\rangle, \quad |-\delta\rangle = |S_x;-\rangle$$

となる。つまり x 軸方向を向いた均一磁場 $B = (2mc/|e|\hbar)\delta$ 中の電子の歳差運動 に対応する。

問 9　1 個の粒子を入れた箱が、薄い隔壁で左右の部屋に分かれている。粒子が確実に右（または左）側にいることが分かっているとき、状態を位置固有ケット $|R\rangle$（または $|L\rangle$）で表すことにする。ここで粒子が半分の箱の中のどこにいるかは問題にしない。このときもっとも一般的な状態ベクトルは

$$|\alpha\rangle = |R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle\langle L|\alpha\rangle$$

のように表される。$\langle R|\alpha\rangle$ と $\langle L|\alpha\rangle$ は「波動関数」とみなすことができる。粒子は隔壁を通って **トンネル運動** することができるとし、このトンネル効果をハミルトニアン

$$H = \Delta\left(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|\right)$$

で記述する。ここで Δ はエネルギーの次元を持った実数である。

a. 規格化されたエネルギー固有ケットを見いだせ。対応するエネルギー固有値はいくらか。

b. シュレーディンガー表示では **基底ケット** $|R\rangle$ および $|L\rangle$ は固定されていて、状態ベクトルが時間変化する。系が $t = 0$ で上述の $|\alpha\rangle$ によって表されていたとする。$|\alpha\rangle$ に適当な時間発展の演算子をかけることにより、$t > 0$ に対して状態ベクトル $|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$ を見いだせ。

c. $t = 0$ で粒子が確かに右にいたとせよ。粒子を左側で観測する確率は、時間の関数としてどうなるか。

d. 波動関数 $\langle R|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$ および $\langle L|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$ に対する **連立シュレーディンガー方程式** を書け。この連立シュレーディンガー方程式の解は、**b.** から求められるものと同じであることを示せ。

e. 印刷屋がミスをして H を

$$H = \Delta|L\rangle\langle R|$$

と書いたとしよう。このハミルトニアンで時間的発展をする問題をもっとも一般的に解き、**確率の保存則** が破られていることを示せ。

［解答］

a. 前問と全く同様に

$$
\begin{aligned}
|E_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|L\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|R\rangle \quad E_1 = \Delta \\
|E_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|L\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|R\rangle \quad E_2 = -\Delta
\end{aligned}
$$

b.

$$
\begin{aligned}
&|\alpha, t_0 = 0; t\rangle \\
&= \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)(|R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle\langle L|\alpha\rangle) \\
&= \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)\left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle - |E_2\rangle)\langle R|\alpha\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle + |E_2\rangle)\langle L|\alpha\rangle\right] \\
&= \frac{1}{2}\exp\left(\frac{-i\Delta t}{\hbar}\right)(\langle L|\alpha\rangle + \langle R|\alpha\rangle)(|L\rangle + |R\rangle) \\
&\quad + \frac{1}{2}\exp\left(\frac{+i\Delta t}{\hbar}\right)(\langle L|\alpha\rangle - \langle R|\alpha\rangle)(|L\rangle - |R\rangle) \\
&= \left[\cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\langle L|\alpha\rangle - i\sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\langle R|\alpha\rangle\right]|L\rangle \\
&\quad + \left[\cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\langle R|\alpha\rangle - i\sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\langle L|\alpha\rangle\right]|R\rangle
\end{aligned}
$$

c. 設問 (b.) の結果で $\langle R|\alpha, t = 0\rangle = 1, \langle L|\alpha, t = 0\rangle = 0$ とすると

$$
|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)|R\rangle - i\sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)|L\rangle
$$

よって

$$
|\langle L|\alpha, t_0 = 0; t\rangle|^2 = \sin^2\frac{\Delta t}{\hbar}
$$

d. ケットに対するシュレーディンガー方程式

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha; t\rangle = H|\alpha; t\rangle
$$

に左から $\langle R|$ と $\langle L|$ をそれぞれかけると

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle R|\alpha, t_0 = 0; t\rangle &= \langle R|H|\alpha, t_0 = 0; t\rangle \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle L|\alpha, t_0 = 0; t\rangle &= \langle L|H|\alpha, t_0 = 0; t\rangle
\end{aligned}
$$

となるので、波動関数に対する連立シュレーディンガー方程式

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle R|\alpha, t_0=0;t\rangle &= \Delta\langle L|\alpha, t_0=0;t\rangle \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle L|\alpha, t_0=0;t\rangle &= \Delta\langle R|\alpha, t_0=0;t\rangle \end{aligned}$$

を得る。まとめて書けば、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \langle R|\alpha, t_0=0;t\rangle \\ \langle L|\alpha, t_0=0;t\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle R|\alpha, t_0=0;t\rangle \\ \langle L|\alpha, t_0=0;t\rangle \end{pmatrix}$$

よって

$$\begin{pmatrix} \langle R|\alpha, t_0=0;t\rangle \\ \langle L|\alpha, t_0=0;t\rangle \end{pmatrix} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{pmatrix}t\right)\begin{pmatrix} \langle R|\alpha\rangle \\ \langle L|\alpha\rangle \end{pmatrix}$$

従って、

$$\begin{aligned} &\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{pmatrix}t\right) \\ &= \mathbf{I} + \frac{i\Delta t}{\hbar}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2!}\left(\frac{i\Delta t}{\hbar}\right)^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &\quad + \frac{1}{3!}\left(\frac{i\Delta t}{\hbar}\right)^3\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \cdots \\ &= \cos\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i\sin\left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\Delta t/\hbar) & -i\sin(\Delta t/\hbar) \\ -i\sin(\Delta t/\hbar) & \cos(\Delta t/\hbar) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

以上より

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \langle R|\alpha, t_0=0;t\rangle \\ \langle L|\alpha, t_0=0;t\rangle \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos(\Delta t/\hbar) & -i\sin(\Delta t/\hbar) \\ -i\sin(\Delta t/\hbar) & \cos(\Delta t/\hbar) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \langle R|\alpha\rangle \\ \langle L|\alpha\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\Delta t/\hbar)\langle R|\alpha\rangle - i\sin(\Delta t/\hbar)\langle L|\alpha\rangle \\ \cos(\Delta t/\hbar)\langle L|\alpha\rangle - i\sin(\Delta t/\hbar)\langle R|\alpha\rangle \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e. 最初 $\langle\alpha; t=0|\alpha; t=0\rangle = 1$ でも

$$\begin{aligned} \langle\alpha; t|\alpha; t\rangle &= \langle\alpha|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\Delta|R\rangle\langle L|t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\Delta|L\rangle\langle R|t\right)|\alpha\rangle \\ &\neq \langle\alpha; t=0|\alpha; t=0\rangle \end{aligned}$$

となる。つまり、問 2 と同様に確率保存則がやぶれている。

問１０　１次元の **調和振動子** を例として用い、 **ハイゼンベルク表示** と **シュレーディンガー表示** の差を説明せよ。特に（ａ）力学変数 x および p が、（ｂ）もっとも一般的な状態ベクトルが、この２つの表示のそれぞれでどのように **時間発展** をするか議論せよ。

［解答］１次元調和振動子のハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

である。

a. 力学変数 x および p

シュレーディンガー表示 不変

ハイゼンベルク表示 ハイゼンベルク方程式

$$\begin{aligned}
\frac{dx(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[x(t), H] = \frac{p(t)}{m} \\
\frac{dp(t)}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[p(t), H] = -m\omega^2 x(t)
\end{aligned}$$

より

$$\begin{aligned}
x(t) &= x(0)\cos\omega t + \left(\frac{p(0)}{m\omega}\right)\sin\omega t \\
p(t) &= -m\omega x(0)\sin\omega t + p(0)\cos\omega t
\end{aligned}$$

を得る。

b. 一般的な状態ベクトル

シュレーディンガー表示　$|\alpha\rangle$ をエネルギー固有ケット $\{|n\rangle\}$ で展開して

$$\begin{aligned}
|\alpha, t\rangle = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|\alpha\rangle &= \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)\sum_{n=0}^{\infty}\langle n|\alpha\rangle|n\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\langle n|\alpha\rangle \exp\left(-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t\right)|n\rangle \\
&\doteq \begin{pmatrix} \langle 0|\alpha\rangle \exp\left(-i\frac{1}{2}\omega t\right) \\ \langle 1|\alpha\rangle \exp\left(-i\frac{3}{2}\omega t\right) \\ \langle 2|\alpha\rangle \exp\left(-i\frac{5}{2}\omega t\right) \\ \vdots \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

となる。

ハイゼンベルク表示 一般的な状態ベクトルは不変である。

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle &= |\alpha\rangle \\ &\doteq \begin{pmatrix} \langle 0|\alpha\rangle \\ \langle 1|\alpha\rangle \\ \langle 2|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

そのかわり、基底ケットが時刻に依存する。

$$|n, t\rangle = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)|n\rangle$$

したがって、どちらの表示をつかっても、状態 n に見い出す確率振幅 $c_n(t)$ は、

$$c_n(t) = \langle n|\alpha, t\rangle = \langle n, t|\alpha\rangle = \exp\left(-i\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega t\right)\langle n|\alpha\rangle$$

となる。

問１１　１次元 **調和振動子** のポテンシャル中にある１粒子を考察する。$t=0$ で、状態ベクトルが

$$|\alpha\rangle = \exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle$$

のように与えられたとする。ここで p は運動量演算子であり、a は長さの次元を持つ量である。 **ハイゼンベルク表示** を用いて、 **期待値** $< x >$ を $t \geq 0$ に対し計算せよ。

［解答］　問１０の a. の結果より、ハイゼンベルク表示の位置演算子は

$$x(t) = x\cos\omega t + \frac{p}{m\omega}\sin\omega t$$

と書けることと、運動量演算子 p が無限小の **平行移動演算子** であること

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right) x \exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right) &= x + a \\
\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right) p \exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right) &= p
\end{aligned}$$

を用いて、

$$\begin{aligned}
&\langle x(t)\rangle \\
&= \langle 0|\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right)(x\cos\omega t + \frac{p}{m\omega}\sin\omega t)\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle \\
&= \cos\omega t\langle 0|\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right) x \exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle + \frac{\sin\omega t}{m\omega}\langle 0|p|0\rangle \\
&= \cos\omega t(\langle 0|x|0\rangle + a) + \frac{\sin\omega t}{m\omega}\langle 0|p|0\rangle \\
&= a\cos\omega t
\end{aligned}$$

を得る。

時刻 $t=0$ での波動関数は

$$\langle x|\alpha\rangle = \langle x|\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = \langle x-a|0\rangle$$

となるので（問１２参照）、$|\alpha\rangle$ は古典力学でバネをつりあいの位置から a だけずらした状態に対応する。したがって、振動子の位置の期待値は振幅 a、振動数 ω で振動する。

問１２

a. 問１１で、$t=0$ で指定した状態に対して、位置座標空間における波動関数を書け。次式

$$\langle x'|0\rangle = \pi^{-1/4}x_0^{-1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right),\ \left(x_0 \equiv \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\right)$$

を用いてもよい。

b. 状態が $t=0$ で基底状態に見いだされる確率の簡潔な表式を求めよ。この確率は $t>0$ で変化するか。

［解答］

a.

$$\langle x'|\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle = \langle x'|\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{ia}{\hbar}\right)^n p^n|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{ia}{\hbar}\right)^n\langle x'|p^n|0\rangle$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{ia}{\hbar}\right)^n(-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x'^n}\langle x'|0\rangle = \pi^{-\frac{1}{4}}x_0^{-\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x'-a}{x_0}\right)^2\right)$$

b.

$$\langle 0|\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)|0\rangle = \int dx'\langle 0|x'\rangle\langle x'|\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)|0\rangle$$

$$= \pi^{\frac{1}{2}}x_0^{-1}\int dx'\exp\left(-\frac{1}{x_0^2}\left(x'^2-ax'+\frac{a^2}{2}\right)\right)$$

$$= \pi^{\frac{1}{2}}x_0^{-1}\exp\left(-\frac{a^2}{4x_0^2}\right)\int dx'\exp\left(-\left(\frac{x'-a/2}{x_0}\right)^2\right) = \exp\left(-\frac{a^2}{4x_0^2}\right)$$

よって

$$P_0(t=0) = \left|\langle 0|\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)|0\rangle\right|^2 = \exp\left(-\frac{a^2}{2x_0^2}\right)$$

$$P_0(t) = \left|\langle 0|\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)|0\rangle\right|^2$$

$$= \left|\exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)\langle 0|\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)|0\rangle\right|^2 = P_0(t=0)$$

で変化しない。

問13　1次元の **調和振動子** を考える。

a. 次式

$$\left.\begin{matrix} a \\ a^\dagger \end{matrix}\right\} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x \pm \frac{ip}{m\omega}\right), \quad \left.\begin{matrix} a|n\rangle \\ a^\dagger|n\rangle \end{matrix}\right\} = \left\{\begin{matrix} \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{matrix}\right.$$

を用いて **行列要素** $\langle m|x|n\rangle, \langle m|p|n\rangle, \langle m|\{x,p\}|n\rangle$, $\langle m|x^2|n\rangle$ および $\langle m|p^2|n\rangle$ を計算せよ。

b. エネルギーの固有状態に関してとった運動エネルギーと位置エネルギーの **期待値** に対して、 **ビリアル定理** （問6参照）

$$\langle\frac{p^2}{m}\rangle = \langle x\frac{d}{dx}V\rangle$$

が成り立つ事を確かめよ。

［解答］

a.　**生成消滅演算子** を用いて x,p を表すと、

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \\ p &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a - a^\dagger) \end{aligned}$$

となることを用いる。

$$\begin{aligned} \langle m|x|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle m|a|n\rangle + \langle m|a^\dagger|n\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}) \\ \langle m|p|n\rangle &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\langle m|a|n\rangle - \langle m|a^\dagger|n\rangle) \\ &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}((\sqrt{n}\delta_{m,n-1} - \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}) \\ \{x,p\} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(-i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\right)\{a + a^\dagger, a - a^\dagger\} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -i\hbar(a^2 - a^{\dagger 2}) \\
\langle m|\{x,p\}|n\rangle &= -i\hbar(\langle m|a^2|n\rangle - \langle m|a^{\dagger 2}|n\rangle) \\
&= -i\hbar(\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} - \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}) \\
\langle m|x^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle m|a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a|n\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}(\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} + (2n+1)\delta_{m,n}) \\
\langle m|p^2|n\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle m|a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a|n\rangle \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}(\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2} - (2n+1)\delta_{m,n})
\end{aligned}
$$

b. 設問 (a.) の結果より

$$
\begin{aligned}
\langle n|\frac{p^2}{m}|n\rangle &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \\
\langle n|x\frac{d}{dx}V|n\rangle &= \langle n|x\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)|n\rangle \\
&= m\omega^2\langle n|x^2|n\rangle \\
&= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
$$

したがって、

$$
\langle n|\frac{p^2}{m}|n\rangle = \langle n|x\frac{d}{dx}V|n\rangle
$$

となってビリアル定理が成り立つ。このように、調和振動子 ($V = \frac{m\omega^2}{2}x^2$) の場合

$$
\langle\frac{p^2}{m}\rangle = \langle\frac{m\omega^2}{2}x^2\rangle
$$

となって、全エネルギーは運動エネルギーとポテンシャルエネルギーに等分配される。

問14

a. 変換関数

$$\langle x'|p'\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\exp(ip'x'/\hbar) \qquad (1\text{次元})$$

を用い

$$\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\alpha\rangle$$

を証明せよ。

b. 1次元の **調和振動子** を考える。状態ベクトルに対するシュレーディンガー方程式から出発して、 **運動量空間の波動関数** に対する **シュレーディンガー方程式** を導け。（演算子 p と固有値 p' の違いをはっきりとさせよ。）運動量空間におけるエネルギー固有関数を推測できるか。

［解答］

a.

$$\begin{aligned}
\langle p'|x|\alpha\rangle &= \int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|x|\alpha\rangle \\
&= \int dx'\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{ip'x'}{\hbar}\right)x'\langle x'|\alpha\rangle \\
&= \int dx' i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{ip'x'}{\hbar}\right)\right)\langle x'|\alpha\rangle \\
&= \int dx' i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\int dx'\langle p'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\
&= i\hbar\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\alpha\rangle
\end{aligned}$$

b. ケットに対する時間に依存したシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha;t\rangle = H|\alpha;t\rangle$$

に左から $\langle p'|$ をかけて、運動量空間の波動関数に対する時間に依存したシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle p'|\alpha;t\rangle \quad = \quad \langle p'|\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2|\alpha;t\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{p'^2}{2m}\langle p'|\alpha;t\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\right)\langle p'|\alpha;t\rangle \\
&= -\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\langle p'|\alpha;t\rangle + \frac{p'^2}{2m}\langle p'|\alpha;t\rangle
\end{aligned}
$$

を得る。したがって、時間に依存しないシュレーディンガー方程式は

$$
E_n\langle p'|n\rangle = -\frac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p'^2}\langle p'|n\rangle + \frac{p'^2}{2m}\langle p'|n\rangle
$$

となる。この方程式は係数の置き換え

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{m} &\rightarrow m\omega^2 \\
m\omega^2 &\rightarrow \frac{1}{m}
\end{aligned}
$$

によって、位置空間のシュレーディンガー方程式

$$
E_n\langle x'|n\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}\langle x'|n\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2x'^2\langle x'|n\rangle
$$

と一致する。したがって、位置空間のエネルギー固有関数から推測して、運動量空間のエネルギー固有関数は

$$
\begin{aligned}
\phi_n(p) &= (2^n n!)^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{m\omega\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{1}{2}\zeta^2\right)H_n(\zeta) \\
&\zeta = \frac{p'}{\sqrt{m\omega\hbar}}
\end{aligned}
$$

となる。

問15 **相関関数** と呼ばれる

$$C(t) =< x(t)x(0) >$$

で定義される関数を考える。ここで $x(t)$ は **ハイゼンベルク表示** の位置演算子である。1次元の **調和振動子** の **基底状態** に対して、相関関数を具体的に計算せよ。

［解答］調和振動子のハイゼンベルク表示の位置演算子（問10参照）

$$x(t) = x\cos(\omega t) + \frac{p}{m\omega}\sin(\omega t)$$

を代入して

$$\begin{aligned} C(t) &= \langle 0|x(t)x(0)|0\rangle \\ &= \langle 0|x^2\cos\omega t + \frac{px}{m\omega}\sin\omega t|\rangle \\ &= \cos\omega t\langle 0|x^2|0\rangle + \frac{\sin\omega t}{m\omega}\langle 0|px|0\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\cos(\omega t) + \frac{\sin(\omega t)}{m\omega}(-\frac{i\hbar}{2}) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\exp(-i\omega t) \end{aligned}$$

を得る。ただし、

$$\begin{aligned} px &= -\frac{i\hbar}{2}(a^2 - a^{\dagger 2} - a^\dagger a + aa^\dagger) \\ \langle 0|px|0\rangle &= -\frac{i\hbar}{2} \\ \langle 0|x^2|0\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \end{aligned}$$

を用いた。

問１６　再び１次元の **調和振動子** を考える。代数的にすなわち波動関数を用いずに、次のことを実行せよ。
a. $< x >$ をできるだけ大きくするような、$|0\rangle$ と $|1\rangle$ の１次結合をつくれ。

b. 振動子が $t = 0$ で、（a）で作られた状態にあるとする。$t > 0$ に対する状態ベクトルは、シュレーディンガー表示でどうなるか。$t > 0$ に対する時間の関数として、期待値 $\langle x\rangle$ を (i) シュレーディンガー表示を用いて (ii) **ハイゼンベルク表示** を用いて計算せよ。

c. どちらかの表示を用いて、$\langle(\Delta x)^2\rangle$ を時間の関数として計算せよ。

［解答］
a. 求めるケットを

$$|\alpha\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$$

とおけば、問１３の結果を用いて、

$$\begin{aligned}\langle x\rangle = \langle\alpha|x|\alpha\rangle &= |C_0|^2\langle 0|x|0\rangle + |C_1|^2\langle 1|x|1\rangle \\ &\quad + C_0^*C_1\langle 0|x|1\rangle + C_0C_1^*\langle 1|x|0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(C_0^*C_1 + C_0C_1^*)\end{aligned}$$

$C_0 = r_0\exp(i\theta_0), C_1 = r_1\exp(i\theta_1),\ r_0^2 + r_1^2 = 1$ （r_i, θ_i は実数）として

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}r_0r_1\left(\exp(i(\theta_1-\theta_0)) + \exp(i(\theta_0-\theta_1))\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}2r_0r_1\cos(\theta_0-\theta_1)\end{aligned}$$

ここで r_0r_1 は $1/2$ が最大で、$\cos(\theta_0-\theta_1)$ は 1 が最大なので、

$$|\alpha\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

となる。

b. (i)　時刻 t での状態ケットを $|\alpha; t\rangle$ とおけば

$$\begin{aligned}|\alpha, t\rangle &= \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{1}{2}i\omega t\right)|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{3}{2}i\omega t\right)|1\rangle \qquad (1)\end{aligned}$$

より、

$$
\begin{aligned}
&\langle\alpha,t|x|\alpha,t\rangle\\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(\frac{1}{2}i\omega t\right)\langle 0| + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(\frac{3}{2}i\omega t\right)\langle 1|\right)\times\\
&\quad x\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{1}{2}i\omega t\right)|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{3}{2}i\omega t\right)|1\rangle\right)\\
&= \frac{1}{2}(\exp(-i\omega t)\langle 0|x|1\rangle + \exp(i\omega t)\langle 1|x|0\rangle)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos\omega t
\end{aligned}
$$

となる。

(ii) 問10の結果

$$x(t) = x\cos\omega t + \frac{p}{m\omega}\sin\omega t$$

をもちいて

$$
\begin{aligned}
&\langle\alpha|x(t)|\alpha\rangle\\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 0| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1|\right)\left(x\cos\omega t + \frac{p}{m\omega}\sin\omega t\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle\right)\\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cos\omega t
\end{aligned}
$$

となる。

c. シュレーディンガー表示で計算しよう。式(1)より

$$
\begin{aligned}
\langle\alpha,t|x^2|\alpha,t\rangle &= \frac{1}{2}\langle 0|x^2|0\rangle + \frac{1}{2}\langle 1|x^2|1\rangle\\
&\quad + \frac{1}{2}\exp(-i\omega t)\langle 0|x^2|1\rangle + \frac{1}{2}\exp(i\omega t)\langle 1|x^2|0\rangle\\
&= \frac{1}{2}\frac{\hbar}{2m\omega}(1+3) = \frac{\hbar}{m\omega}
\end{aligned}
$$

よって

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - (\langle x\rangle)^2 \ = \ \frac{\hbar}{2m\omega}(1+\sin^2\omega t)$$

を得る。

問１７　１次元 調和振動子 に対して

$$\langle 0|e^{ikx}|0\rangle = \exp[-k^2\langle 0|x^2|0\rangle/2]$$

であることを示せ。ここで x は位置演算子である。

［解答］

$$\begin{aligned}
\langle 0|e^{ikx}|0\rangle &= \int dx'\langle 0|x'\rangle\langle x'|e^{ikx}|0\rangle \\
&= \int dx' e^{ikx'}|\langle x'|0\rangle|^2 \\
&= \int dx' e^{ikx'}\frac{1}{\pi^{1/2}x_0}\exp\left(-\frac{x'^2}{x_0^2}\right) \\
&= \int dx' \frac{1}{\pi^{1/2}x_0}\exp\left(-\frac{x'^2}{x_0^2}+ikx'\right) \\
&= \int dx' \frac{1}{\pi^{1/2}x_0}\exp\left[-\frac{1}{x_0^2}\left(x'-\frac{ikx_0^2}{2}\right)^2-\frac{k^2}{4}x_0^2\right] \\
&= \exp\left(-\frac{k^2}{4}x_0^2\right) = \exp\left(-\frac{k^2\langle 0|x^2|0\rangle}{2}\right)
\end{aligned}$$

ただし、問１３の結果

$$\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2}$$

を用いた。

問１８　１次元 **調和振動子** の **コヒーレント状態** は、（非エルミート的な） **消滅演算子** a の固有状態として定義される：

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

ここで λ は一般に複素数である。

a. 状態ケット

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle$$

が **規格化** されたコヒーレント状態であることを示せ。

b. この状態に対して、 **最小不確定関係** を証明せよ。

c. $|\lambda\rangle$ を

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle$$

の形に書け。$|f(n)|^2$ の n に関する分布が、ポアソン型であることを示せ。$|f(n)|$ を最大にする n の値、したがって E の値を見出せ。

d. コヒーレント状態は（有限変位の） **平行移動演算子** $e^{-ipl/\hbar}$ を **基底状態** に作用させることによっても得られることを示せ。ここで p は運動量演算子で、l は変位の距離である。

（Gottfried 1966, pp.262-64 をも参考にせよ。）

［解答］

a.　すぐ後で証明する設問 c. の結果を使って、ケット $|\lambda\rangle$ が規格化されていることが、

$$\begin{aligned}
\langle\lambda|\lambda\rangle &= \sum_{n'}\sum_{n} f^*(n')f(n)\langle n'|n\rangle \\
&= \sum_{n}|f(n)|^2 = e^{-|\lambda|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}|\lambda|^{2n} \\
&= e^{-|\lambda|^2}e^{|\lambda|^2} = 1
\end{aligned}$$

と示される。また、コヒーレント状態であることが、 **ベーカー・ハウスドルフの補助定理** を用いて

$$\begin{aligned}
a|\lambda\rangle &= e^{-|\lambda|^2/2}ae^{\lambda a^\dagger}|0\rangle \\
&= e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}\left(e^{-\lambda a^\dagger}ae^{\lambda a^\dagger}\right)|0\rangle
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}\left\{a+[-\lambda a^\dagger,a]+\frac{1}{2!}\left[-\lambda a^\dagger,[-\lambda a^\dagger,a]\right]+\cdots\right\}|0\rangle \\
&= e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}(a+\lambda)|0\rangle = \lambda e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle \\
&= \lambda|\lambda\rangle
\end{aligned}
$$

としめされる。

b. 位置のゆらぎは、

$$
\begin{aligned}
\langle\lambda|x|\lambda\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\langle\lambda|a|\lambda\rangle+\langle\lambda|a^\dagger|\lambda\rangle\right\} \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\{\lambda\langle\lambda|\lambda\rangle+\lambda^*\langle\lambda|\lambda\rangle\} \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\lambda+\lambda^*) \\
\langle\lambda|x^2|\lambda\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{\langle\lambda|a^2|\lambda\rangle+\langle\lambda|a^{\dagger 2}|\lambda\rangle+\langle\lambda|aa^\dagger|\lambda\rangle+\langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle\right\} \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\lambda^2+\lambda^{*2}+1+2\langle\lambda|a^\dagger a|\lambda\rangle\right) \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{(\lambda+\lambda^*)^2+1\right\} \\
\therefore\langle(\Delta x)^2\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left\{(\lambda+\lambda^*)^2+1\right\}-\frac{\hbar}{2m\omega}(\lambda+\lambda^*)^2 \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}
\end{aligned}
$$

であり、運動量のゆらぎは

$$
\begin{aligned}
\langle\lambda|p|\lambda\rangle &= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left\{\langle\lambda|a|\lambda\rangle-\langle\lambda|a^\dagger|\lambda\rangle\right\} \\
&= -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\lambda-\lambda^*) \\
\langle\lambda|p^2|\lambda\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle\lambda|a^2+a^{\dagger 2}-aa^\dagger-a^\dagger a|\lambda\rangle \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}(\lambda^2+\lambda^{\dagger 2}-1-2\lambda\lambda^\dagger) \\
\therefore\langle(\Delta p)^2\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\{(\lambda-\lambda^*)^2-1\right\}+\frac{m\hbar\omega}{2}(\lambda-\lambda^*)^2 \\
&= \frac{m\hbar\omega}{2}
\end{aligned}
$$

となるので、コヒーレント状態 $|\lambda\rangle$ は、最小不確定関係

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\frac{m\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar^2}{4}$$

を満たす。

c. コヒーレント状態 $|\lambda\rangle$ をエネルギー固有状態 $|n\rangle$ で展開すると

$$\begin{aligned}
|\lambda\rangle &= e^{-|\lambda|^2/2}e^{\lambda a^\dagger}|0\rangle = e^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\lambda^n a^{\dagger n}|0\rangle \\
&= e^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\lambda^n\sqrt{n!}|n\rangle \\
&= e^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle
\end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned}
f(n) &= \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}e^{-|\lambda|^2/2} \\
|f(n)|^2 &= \frac{(|\lambda|^2)^n}{n!}e^{-|\lambda|^2}
\end{aligned}$$

を得る。ここで両辺の対数をとると

$$\begin{aligned}
2\ln|f(n)| &= 2n\ln|\lambda| - |\lambda|^2 - \sum_{k=1}^{n}\ln k \\
&= -|\lambda|^2 + \sum_{k=1}^{n}(2\ln|\lambda| - \ln k)
\end{aligned}$$

となる。したがって、不等式

$$2\ln|\lambda| - \ln n \geq 0$$

すなわち

$$|\lambda|^2 \geq n$$

を満たす限り、$|f(n)|$ は増加関数

$$|f(n)| \geq |f(n-1)|$$

となるので、n が $|\lambda|^2$ を越えない最大の整数のとき $|f(n)|$ が最大値をとる。したがって、$|f(n)|$ を最大にする n の値および E の値は、**ガウスの記号** $[\cdot]$ を使って

$$\begin{aligned} n &= \left[|\lambda|^2\right] \\ E &= \left(\left[|\lambda|^2\right] + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \end{aligned}$$

と表される。

d. 調和振動子の基底状態 $|0\rangle$ に有限変位の平行移動演算子 $e^{-ipl/\hbar}$ を作用させた状態

$$|\alpha\rangle = e^{-ipl/\hbar}|0\rangle$$

に消滅演算子 a を作用させると

$$\begin{aligned} a|\alpha\rangle &= \exp\left(-\frac{ipl}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{ipl}{\hbar}\right)a\exp\left(-\frac{ipl}{\hbar}\right)|0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{ipl}{\hbar}\right)\left\{a + \left[\frac{ipl}{\hbar}, a\right] + \frac{1}{2!}\left[\frac{ipl}{\hbar}, \left[\frac{ipl}{\hbar}, a\right]\right] + \cdots\right\}|0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{ipl}{\hbar}\right)\left(a + l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\right)|0\rangle \\ &= l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}|\alpha\rangle \end{aligned}$$

となる。したがって、状態 $|\alpha\rangle$ は、固有値

$$\lambda = l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$$

を持つコヒーレント状態である。ただし、上の計算で **ベーカー・ハウスドルフの補助定理** と交換関係

$$\begin{aligned} \frac{ipl}{\hbar} &= l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(a - a^\dagger) \\ \left[\frac{ipl}{\hbar}, a\right] &= l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \end{aligned}$$

および調和振動子の基底状態の性質 $a|0\rangle = 0$ を使った。

以上のことから、問１１でも扱った、振動する古典的調和振動子に対応する状態 $|\alpha\rangle$ はコヒーレント状態であることが分かる。

問19　$a_\pm$ および $a_\pm^\dagger$ は通常の **交換関係** を満足する二つの独立した **調和振動子** の、 **消滅および生成演算子** である。

$$J_\pm = \hbar a_\pm^\dagger a_\mp, J_z = \frac{\hbar}{2}(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-), N = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-$$

とするとき

$$[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm, [\mathbf{J}^2, J_z] = 0, \mathbf{J}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) N \left[\left(\frac{N}{2}\right) + 1\right]$$

を証明せよ。

［解答］

$$\begin{aligned}
[J_z, J_+] &= \frac{\hbar^2}{2}[a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-, a_+^\dagger a_-] \\
&= \frac{\hbar^2}{2}(a_+^\dagger [a_+, a_+^\dagger] a_- - a_+^\dagger [a_-^\dagger, a_-] a_-) \\
&= \frac{\hbar^2}{2}(a_+^\dagger a_- + a_+^\dagger a_-) = \hbar^2 a_+^\dagger a_- = \hbar J_+ \\
[J_z, J_-] &= \frac{\hbar^2}{2}[a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-, a_-^\dagger a_+] \\
&= \frac{\hbar^2}{2}(a_-^\dagger [a_+^\dagger, a_+] a_+ - a_-^\dagger [a_-, a_-^\dagger] a_+) \\
&= -\hbar^2 a_-^\dagger a_+ = -\hbar J_- \\
\boldsymbol{J}^2 &= J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) \\
&= \frac{\hbar^2}{4}(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-)^2 + \frac{\hbar^2}{2}(a_+^\dagger a_- a_-^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_+ a_+^\dagger a_-) \\
&= \frac{\hbar^2}{2} N \left(\frac{N}{2} + 1\right)
\end{aligned}$$

また、

$$[N, J_z] = [a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-, \frac{\hbar}{2}(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-)] = 0$$

より

$$[\boldsymbol{J}^2, J_z] = 0$$

問２０　次のような形の１次元ポテンシャル

$$V = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}$$

の中にある質量 m の粒子を考える。

a. **基底状態**　のエネルギーはいくらか。

b. 基底状態での期待値 $\langle x^2 \rangle$ はいくらか。

［解答］

a. $V(x<0)=\infty$ より $\varphi(x=0)=0$ であるから、調和振動子

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad ,(-\infty < x < \infty)$$

の固有関数の中で奇関数のもの（$n=1,3,5,\cdots$）が、この問題の固有関数になる。よって、基底状態（$n=1$）のエネルギーは

$$E = \hbar\omega\left(1+\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2}\hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}$$

となる。

b.　区間 $-\infty < x < \infty$ で規格化した調和振動子の固有関数を $\phi_n(x)$ と置けば、

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \frac{\int_0^\infty dx|\phi_1(x)|^2x^2}{\int_0^\infty dx|\phi_1(x)|^2} \\
&= 2\int_0^\infty dx|\phi_1(x)|^2x^2 \\
&= \int_{-\infty}^\infty dx|\phi_1(x)|^2x^2 \\
&= \langle 1|x^2|1\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\cdot 3 = \frac{3\hbar}{2m\omega}
\end{aligned}$$

となる。ただし、$\phi_1(-x) = -\phi_1(x)$ となることおよび問１３で求めた行列要素を使った。

問２１　１次元空間で粒子が２枚の硬い壁の間に捕捉されている：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \text{ に対して} \\ \infty, & x < 0, x > L \text{ に対して} \end{cases}$$

この粒子の $t = 0$ での位置は、厳密に $x = L/2$ であると分かっている。この粒子がいろいろなエネルギー固有状態に見出される相対的確率はいくらか。$t > 0$ に対する波動関数を書け。（規格化定数の値や収束性など、数学的にやっかいなことに気を使う必要はない。）

［解答］エネルギー固有関数とエネルギー固有値は

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (0 \le x \le L) \\ E_n &= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \end{aligned}$$

である。粒子の位置が厳密に $x = L/2$ の状態をエネルギー固有関数で展開すると

$$\begin{aligned} \delta\left(x - \frac{L}{2}\right) &= \sum_n C_n \psi_n(x) \\ C_n &= \int_0^L dx \psi_n^*(x) \delta\left(x - \frac{L}{2}\right) \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \end{aligned}$$

だから、各固有状態 $\psi_n(x)$ に見いだされる確率 $P_{rel}(n)$ は

$$\begin{aligned} P_{rel}(n) &= \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi}{2}\right) = \frac{2}{L} \frac{1 - \cos(n\pi)}{2} \\ &= \frac{1}{L} \{1 - (-1)^n\} \end{aligned}$$

となる。$t > 0$ における波動関数は

$$\begin{aligned} \varphi(x, t) &= \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) C_n \psi_n(x) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2(2k+1)^2}{2mL^2} t\right) \sqrt{\frac{2}{L}} (-1)^k \sin\left(\frac{(2k+1)\pi}{L} x\right) \end{aligned}$$

となる。ただし、n が偶数のとき C_n がゼロになることを考慮して、n についての和を $n = 2k + 1$ と置いて k についての和に置き換えた。

問２２　１次元空間で定められた中心に、$\delta-$ 関数型ポテンシャル

$$V(x) = -v_0\delta(x), \quad (v_0 \text{は正の実数})$$

によって **束縛** されている１粒子を考えよう。 **基底状態** の波動関数と束縛エネルギーを見出せ。励起束縛状態はあるか。

［解答］　位置空間でのシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + (-v_0\delta(x))\,\phi(x) = E\phi(x)$$

は、$x \neq 0$ で $V = 0$ となるので

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = E\phi(x)$$

となる。したがって、$x \to \pm\infty$ で発散しない $E < 0$ の解は

$$\begin{aligned} \phi(x) &= N\exp(-\kappa|x|) \quad (x \neq 0) \\ \kappa &= \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \end{aligned}$$

となる。ただし、N は規格化定数である。波動関数の連続性を保つため原点で $\phi(x=0) = N$ と定義しよう。

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}\exp(-\kappa|x|) &= -\kappa(2\theta(x)-1)\exp(-\kappa|x|) \\ \frac{d^2}{dx^2}\exp(-\kappa|x|) &= -2\kappa\delta(x)\exp(-\kappa|x|) + \kappa^2(2\theta(x)-1)^2\exp(-\kappa|x|) \end{aligned}$$

であるから、シュレーディンガー方程式が原点 $x = 0$ をふくめて全領域でなりたつ条件は

$$v_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \times 2\kappa$$

すなわち、束縛エネルギーが

$$E = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2}$$

となることである。これは唯一の解だから励起束縛状態はない。

【別解】位置空間でのシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x)+(-v_0\delta(x))\,\phi(x)=E\phi(x)$$

に波動関数 $\phi(x)$ とデルタ関数 $\delta(x)$ のフーリエ変換

$$\begin{aligned}\phi(x) &= \int\frac{dk}{2\pi}\tilde{\phi}(k)e^{ikx}\\ \delta(x) &= \int\frac{dk}{2\pi}e^{ikx}\end{aligned}$$

を代入して、デルタ関数の公式

$$\phi(x)\delta(x)=\phi(0)\delta(x)$$

を使えば、運動量空間のシュレーディンガー方程式

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}\tilde{\phi}(k)-v_0\phi(x=0)=E\tilde{\phi}(k)$$

を得る。**運動量空間の波動関数** $\tilde{\phi}(k)$ について解いて、束縛状態 $E=-|E|$ について $\kappa^2=2m|E|/\hbar^2$ と置けば、

$$\tilde{\phi}(k)=\frac{v_0\phi(0)}{\hbar^2k^2/2m-E}=\frac{2mv_0\phi(0)/\hbar^2}{k^2+\kappa^2}$$

となるので、位置空間での波動関数

$$\begin{aligned}\phi(x) &= \frac{1}{2\pi}\int\frac{2mv_0\phi(0)/\hbar^2}{k^2+\kappa^2}e^{ikx}dk\\ &= \frac{1}{2\pi}\frac{2mv_0\phi(0)/\hbar^2}{2i\kappa}\int\left(\frac{1}{k-i\kappa}-\frac{1}{k+i\kappa}\right)e^{ikx}dk\end{aligned}$$

を得る。x が正のときと負のときに場合分けして留数積分を行えば、

$$\phi(x)=\frac{mv_0}{\hbar^2\kappa}\phi(0)e^{-\kappa|x|}$$

となる。この式に $x=0$ を代入すれば、エネルギー固有値 E を決める条件

$$\phi(x=0)=\frac{mv_0}{\hbar^2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m|E|}}\phi(0)$$

が得られる。$\phi(0) \neq 0$ より 唯一の 束縛状態のエネルギー固有値は

$$E = -\frac{mv_0^2}{2\hbar^2}$$

となり、波動関数は

$$\phi(x) = \phi(0)e^{-\kappa|x|}$$

と書ける。束縛状態のエネルギーはただ一つだから、束縛励起状態はない。
規格化条件

$$|\phi(0)|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2(mv_0/\hbar^2)|x|}dx = \frac{\hbar^2}{mv_0}|\phi(0)|^2 = 1$$

より、 $\phi(0) = \sqrt{mv_0/\hbar^2}$ となるから、

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{mv_0}{\hbar^2}}e^{-(mv_0/\hbar^2)|x|}$$

となる。

問２３　質量mを持つ１次元空間内の粒子が、定められた中心に、δ−関数型引力ポテンシャル

$$V(x) = -\lambda\delta(x), \quad (\lambda > 0)$$

によって **束縛** されている。時刻$t = 0$で、このポテンシャルが急に消された（すなわち$t > 0$で$V = 0$）。$t > 0$に対する波動関数を求めよ。（定量的に求めよ。しかし、現れる積分の計算を実行する必要はない。）

［解答］問２２の結果より、$t = 0$での波動関数は$\kappa = m\lambda/\hbar^2$として

$$\phi(x, t=0) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{2\kappa^{3/2}}{k^2+\kappa^2} e^{ikx}$$

で表される。$t > 0$ではポテンシャルVがゼロなので、時間発展演算子は

$$U(t) = \exp\left(-\frac{iH}{\hbar}t\right) = \exp\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}t\right)$$

と表される。したがって、

$$\begin{aligned}
\phi(x,t) &= U(t)\phi(x,0) \\
&= \exp\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}t\right)\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2\kappa^{3/2}}{k^2+\kappa^2}e^{ikx}dk \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2\kappa^{3/2}}{k^2+\kappa^2}\exp\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}t\right)e^{ikx}dk \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{2\kappa^{3/2}}{k^2+\kappa^2}\exp\left(-i\frac{\hbar k^2}{2m}t + ikx\right)dk
\end{aligned}$$

となる。

問２４　１次元空間 $(-\infty < x < \infty)$ にある粒子が

$$V = \lambda x, \quad (\lambda > 0)$$

から導かれる一定の力を受けている。
a. エネルギースペクトルは連続か不連続か。E で指定されるエネルギー固有関数の近似的表式を書け。またその大よそを図示せよ。

b. V を

$$V = \lambda |x|$$

で置き換えたとき、どのような変更が必要となるかを簡潔に議論せよ。

［解答］まず、**ＷＫＢ近似** で考えよう。

a. $x = -\infty$ から入射したエネルギー E の粒子は古典的転回点 $x_2 = E/\lambda$ 付近で反射されて再び $x = -\infty$ へ飛び去る。領域 $x_2 < x$ で減衰するＷＫＢ解は

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(V(x)-E)^{1/4}} \exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x2}^{x} dx' \sqrt{2m(V(x')-E)}\right] \\ = & \ \frac{1}{(\lambda x - E)^{1/4}} \exp\left[-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2m\lambda}{\hbar^2}}\left(x - \frac{E}{\lambda}\right)^{3/2}\right] \end{aligned}$$

となり、領域 $x < x_2$ でこれに接続するＷＫＢ解は

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(E-V(x))^{1/4}} \cos\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x}^{x2} dx' \sqrt{2m(E-V(x'))} + \frac{\pi}{4}\right] \qquad (1) \\ = & \ \frac{1}{(E-\lambda x)^{1/4}} \cos\left[-\frac{2}{3}\sqrt{\frac{2m\lambda}{\hbar^2}}\left(\frac{E}{\lambda} - x\right)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned}$$

となる。領域 $x < x_2$ で波動関数の **位相にたいする制限** がないので、エネルギーは **連続スペクトル** となる。

b. 粒子は二つの古典的転回点 $x_1 = -E/\lambda$ と $x_2 = +E/\lambda$ の間に束縛されている。領域 $x_2 < x$ で減衰するＷＫＢ解および領域 $x_1 < x < x_2$ でこれに接続するＷＫＢ解は式 (1) とおなじである。こんどは、領域 $x < x_1$ の領域で減衰するＷＫＢ解

$$\frac{1}{(V(x)-E)^{1/4}} \exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x}^{x1} dx' \sqrt{2m(V(x')-E)}\right]$$

に接続するような領域 $x_1 < x < x_2$ のWKB解は

$$\frac{1}{(E-V(x))^{1/4}}\cos\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_x^{x2}dx'\sqrt{2m(E-V(x'))}-\frac{\pi}{4}\right] \qquad (2)$$

である。領域 $x_1 < x < x_2$ で波動関数が1価であるためには、式(1)と(2)のコサインの中身の差が π の整数倍でなければならない。したがって、量子化条件

$$\begin{aligned}\int_{x1}^{x2}dx\sqrt{2m(E-V(x))} &= \frac{2(2mE)^{3/2}}{3m\lambda}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar \\ E_n &= \frac{1}{2m}\left[\frac{3}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar m\lambda\right]^{2/3}\end{aligned}$$

をみたすエネルギーだけが許される。したがって、エネルギースペクトルは離散的になる。

【厳密解】

a. まず、$E=0$ の場合を考える。シュレーディンガー方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi(x)+\lambda x\phi(x)=0$$

となり、変数変換

$$z=\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3}x$$

を行えば、**エアリー関数** の微分方程式

$$\left[\frac{d^2}{dz^2}-z\right]f(z)=0$$

に変換される。上の微分方程式の二つの独立な解のうち $x\to\infty$ で発散しないほうの解をエアリー関数 $Ai(z)$ と名付ける。したがって、エネルギー $E=0$ のときのシュレーディンガー方程式の厳密解は、エアリー関数をつかって

$$\phi(x)=N\ Ai\left[\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3}x\right]$$

とあらわされる。ただし、N は規格化定数である。

エネルギーがゼロでないときは、古典的転回点が $x = 0$ から $x = E/\lambda$ にずれるので、厳密解は

$$\phi(x) = N\ Ai\left[\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(x - \frac{E}{\lambda}\right)\right] \tag{3}$$

となる。粒子は、有限の空間に閉じこめられていないので、エネルギースペクトルは連続である。

古典的転回点から離れた領域 $|x| \to \infty$ では、厳密解がWKB解に近づくことに注意せよ。

b. 設問 (a.) の結果より、領域 $0 < x$ での厳密解 $\phi_2(x)$ は式 (3) であたえられる。同様にして、領域 $x < 0$ での厳密解 $\phi_1(x)$ は

$$\phi_1(x) = N\ Ai\left[\left(\frac{2m\lambda}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(-x - \frac{E}{\lambda}\right)\right] \tag{4}$$

によってあたえられる。この二つの解を原点 $x = 0$ でなめらかに接続する必要がある。ところで、ポテンシャルが **左右対称** なので解は **パリティ** 固有関数である。パリティが奇のとき、接続条件は

$$\phi_1(x = 0) = \phi_2(x = 0) = 0$$

であるから、エネルギー

$$E = \left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\right)^{1/3}\alpha_n$$

のみが許される。パリティが偶のとき、接続条件は

$$\frac{d\phi_1}{dx}(x = 0) = \frac{d\phi_2}{dx}(x = 0) = 0$$

であるから、エネルギー

$$E = \left(\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\right)^{1/3}\beta_n$$

のみが許される。ただし、$-\alpha_n$ と $-\beta_n$ はエアリー関数 $Ai(x)$ とその微分 $Ai'(x)$ の n 番目のゼロ点

$$\begin{aligned} Ai(-\alpha_n) &= 0 \\ Ai'(-\beta_n) &= 0 \end{aligned}$$

である。結果として、粒子が有限な空間内に閉じこめられているので、エネルギーが離散的になる。

問２５　中空の円柱殻の内部に閉じ込められた１電子を考える。円柱の軸は $z-$ 軸と一致している。波動関数は内側ならびに外側の壁、$\rho = \rho_a$ および $\rho = \rho_b$ の上で、また円柱の底面 $z = 0$ と天上の面 $z = L$ でゼロになるものとする。

a. エネルギー固有関数を求めよ（規格化のことは考えなくてよい）。エネルギー固有値は

$$E_{lmn} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left[k_{mn}^2 + \left(\frac{l\pi}{L}\right)^2\right]$$
$$(l = 1, 2, 3 \cdots, \quad m = 0, 1, 2 \cdots)$$

で与えられることを示せ。ここで k_{mn} は超越方程式

$$J_m(k_{mn}\rho_b)N_m(k_{mn}\rho_a) - N_m(k_{mn}\rho_b)J_m(k_{mn}\rho_a) = 0$$

の n 番目の根である。

b. 上と同じ問題を、$0 < \rho < \rho_a$ に均一磁場 $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ がある場合にもう一度考えよ。電子は決して磁場に「接触して」いないのであるが、エネルギー固有値には磁場の影響があることに注意せよ。

c. 特に $B = 0$ の問題の **基底状態** を、$B \neq 0$ の問題の基底状態と比較せよ。B が存在しても基底状態のエネルギーが変化しないことを要求すると、「 **磁束の量子化** 」

$$\pi\rho_a^2 B = \frac{2\pi N\hbar c}{e}, \quad (N = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots)$$

が得られることを示せ。

［解答］

a.　　シュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi = E\phi$$

を円柱座標 (ρ, z, θ) で表せば

$$\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial\phi}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial z^2} + \bar{k}^2\phi = 0$$

となる。ただし

$$\bar{k}^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

と置いた。波動関数の変数分離

$$\phi(\rho, z, \theta) = \phi_\rho(\rho) \cdot \phi_z(z) \cdot \phi_\theta(\theta)$$

を行えば、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d\phi_\rho}{d\rho}\right) + \left(k^2 - \frac{m^2}{\rho^2}\right)\phi_\rho &= 0 &(1)\\
\frac{d^2\phi_z}{dz^2} + k_z^2\phi_z &= 0 &(2)\\
\frac{d^2\phi_\theta}{d\theta^2} &= -m^2\phi_\theta &(3)
\end{aligned}$$

を得る。ただし、$k^2 \equiv \bar{k}^2 - k_z^2$ であり、$\hbar^2 k^2/2m$ は ρ 方向と θ 方向のエネルギーの和を表す。これらの方程式の解は

$$\begin{aligned}
\phi_\rho &= AJ_{|m|}(k\rho) + BN_{|m|}(k\rho)\\
\phi_z &= C_z \sin k_z\\
\phi_\theta &= C_\theta e^{im\theta}
\end{aligned}$$

となる。$J_m(x), N_m(x)$ は 2 つの独立な m 次の **ベッセル関数** であり、A, B, C_z, C_θ は規格化定数である。ϕ_z に対する $z = 0, L$ での境界条件 $\phi_z(0) = \phi_z(L) = 0$ と ϕ_θ に関する周期的境界条件 $\phi_\theta(\theta) = \phi_\theta(\theta + 2\pi)$ から

$$\begin{aligned}
k_z &= \frac{l\pi}{L} \quad (l = 1, 2, 3 \cdots)\\
m &= 0, \pm 1, \pm 2 \cdots
\end{aligned}$$

を得る。また、ϕ_ρ に対する $\rho = \rho_a, \rho_b$ での境界条件

$$\begin{pmatrix} J_{|m|}(k\rho_b) & N_{|m|}(k\rho_b) \\ J_{|m|}(k\rho_a) & N_{|m|}(k\rho_a) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0$$

を満たす $(A, B) \neq (0, 0)$ が存在するための条件

$$\begin{aligned}
&\begin{vmatrix} J_{|m|}(k\rho_b) & N_{|m|}(k\rho_b) \\ J_{|m|}(k\rho_a) & N_{|m|}(k\rho_a) \end{vmatrix}\\
&= J_{|m|}(k\rho_b)N_{|m|}(k\rho_a) - N_{|m|}(k\rho_b)J_{|m|}(k\rho_a)\\
&= 0
\end{aligned}$$

が成り立つように解 k を決める必要がある。n 番目の解は $|m|$ に依存するので $k_{|m|n}$ とおくとエネルギー固有値は

$$E_{lmn} = \frac{\hbar^2 \bar{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{k_{|m|n}^2 + \left(\frac{l\pi}{L}\right)^2\right\}$$

となる。

b. $\mathbf{B} = B\hat{z}$ がある場合、ストークスの定理を使って中空を貫く磁束 Φ をもとめると、

$$\Phi = \int \mathbf{B}\cdot d\mathbf{S} = \pi\rho_a^2 B = \int_{C(\rho)} \mathbf{A}\cdot d\mathbf{l} = 2\pi\rho A_\theta$$

となるので、ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は、

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi\rho}\hat{\boldsymbol{\theta}}$$

と表される。したがって、置き換え

$$\nabla \to \nabla - \frac{ie}{\hbar c}\mathbf{A} = \nabla - i\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{\rho}\hat{\boldsymbol{\theta}}$$

を行うと、方程式 (1),(2),(3) のうち式 (3) のみが変化し

$$\left(\frac{d}{d\theta} - i\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 \phi_\theta = -m^2\phi_\theta$$

となる。ただし、磁束量子と呼ぶべき量

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} \tag{4}$$

を定義した。この方程式の解は

$$\begin{aligned}\phi_\theta &= C_\theta e^{iM\theta}\\ M &= m + \frac{\Phi}{\Phi_0}\end{aligned}$$

である。波動関数の 1 価性より $M = 0, \pm1, \pm2, \cdots$ となる。したがって、

$$m = -\frac{\Phi}{\Phi_0} + 0, \pm1, \pm2, \cdots \tag{5}$$

となる。磁場がある場合に一般に整数になるのは m でなくて M であることに注意しよう。このとき、エネルギーは

$$E_{lMn} \;=\; \frac{\hbar^2}{2m}\left\{k_{mn}^2 + \left(\frac{l\pi}{L}\right)^2\right\}$$

となる。ただし、k_{mn} は方程式

$$J_m(k_{mn}\rho_b)N_m(k_{mn}\rho_a) - N_m(k_{mn}\rho_b)J_m(k_{mn}\rho_a) = 0$$

の n 番目の根である。$B \neq 0$ のとき m に対する **縮退** がとける。

c. エネルギー最低の状態では、式 (5) で $m = 0$ だから、磁束の量子化

$$\Phi = \pi\rho_a^2 B = \frac{2\pi M\hbar c}{e} = M\Phi_0, \quad (M = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots)$$

を得る。

【余談】　円柱殻の半径が大きくて殻の厚さが薄い極限を考えよう。このとき、θ 方向の周期的境界条件に注意すれば、円柱殻を 1 枚の薄い板と簡略化して考えることができるので、波動関数は簡単な関数形になる。

θ 方向の座標を x、ρ 方向の座標を y とおけば、シュレーディンガー方程式は、

$$\begin{aligned}
\frac{d^2\phi_y}{dy^2} + k_y^2\phi_y &= 0 \\
\frac{d^2\phi_z}{dz^2} + k_z^2\phi_z &= 0 \\
\frac{d^2\phi_x}{dx^2} + k_x^2\phi_x &= 0
\end{aligned}$$

となる。境界条件

$$\begin{aligned}
\phi_y(0) &= \phi_y(\rho_b - \rho_a) = 0 \\
\phi_z(0) &= \phi_z(L) = 0 \\
\phi_x(x) &= \phi_x(x + 2\pi\rho_a)
\end{aligned}$$

より、これらの方程式の解

$$\begin{array}{lllllll}\phi_y(y) & = & C_y\sin(k_y y) & k_y & = & n\pi/(\rho_b-\rho_a) & (n=1,2,3\cdots) \\ \phi_z(z) & = & C_z\sin(k_z z) & k_z & = & l\pi/L & (l=1,2,3\cdots) \\ \phi_x(x) & = & C_x\exp(ik_x x) & k_x & = & m/\rho_a & (m=0,\pm1,\pm2,\cdots)\end{array}$$

を得る。よって、全エネルギーは、

$$\begin{aligned} E_{lmn} &= \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2+k_y^2+k_z^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{m^2}{\rho_a^2}+\left(\frac{\pi}{\rho_b-\rho_a}\right)^2 n^2+\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 l^2\right\}\end{aligned}$$

となる。

磁場がある場合、ベクトルポテンシャルは

$$\boldsymbol{A} = \frac{\Phi}{2\pi\rho_a}\hat{\boldsymbol{x}}$$

で与えられるので、x 方向の方程式は

$$\left(\frac{d}{dx}-i\frac{\Phi}{\Phi_0}\frac{1}{\rho_a}\right)^2\phi_x+k_x^2\phi_x=0$$

となり、解は

$$\begin{aligned}\phi_x(x) &= C_x\exp\left[i\left(k_x+\frac{\Phi}{\Phi_0\rho_a}\right)x\right] \\ k_x+\frac{1}{\rho_a}\frac{\Phi}{\Phi_0} &= \frac{M}{\rho_a}(M=0,\pm1,\pm2,\cdots)\end{aligned}$$

となる。よって、全エネルギーは、

$$E_{lMn} = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{\rho_a^2}\left(M-\frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2+\left(\frac{\pi}{\rho_b-\rho_a}\right)^2 n^2+\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 l^2\right\}$$

となる。基底状態のエネルギーが変化しないとすると、再び磁束の量子化

$$\Phi = M\Phi_0$$

が得られる。

さて、円柱殻内を流れる電流を調べてみよう。電流密度にたいする教科書の式 (2.6.31)、(2.6.33)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{j} &= \left(\frac{\hbar}{m}\right) \mathrm{Im}(\phi^* \nabla \phi) - \left(\frac{e}{mc}\right) \boldsymbol{A}\ |\phi|^2 \\ \boldsymbol{j} &= \left(\frac{\rho}{m}\right) \left(\nabla S - \frac{e\boldsymbol{A}}{c}\right) \end{aligned}$$

を使って、円柱殻の断面 y, z 方向について積分すると、x 方向に流れる電流

$$\begin{aligned} I_x &= \frac{e}{2\pi\rho_a} v_x = \frac{e}{2\pi\rho_a} \frac{\Pi_x}{m} \\ &= \left(\frac{e}{2\pi\rho_a m}\right) \left(p_x - \frac{eA_x}{c}\right) = \left(\frac{e}{2\pi\rho_a m}\right) \left(\hbar k_x - \frac{e}{c} \frac{\Phi}{2\pi\rho_a}\right) \end{aligned} \tag{6}$$

を得る。

超伝導体 の円柱殻内部では、マイスナー効果（たとえば参考文献 [7] の超伝導の章をみよ。）により磁場 $\boldsymbol{B}$ がゼロになるので、マクスウェルの方程式 $\nabla \times \boldsymbol{B} = \mu_0 \boldsymbol{j}$ により電流密度 $\boldsymbol{j}$ がゼロになる。したがって、式 (6) で $I_x = 0$ とおいて、磁束の量子化

$$\begin{aligned} \Phi &= M \Phi_{\text{超伝導}} \\ \Phi_{\text{超伝導}} &= \frac{2\pi\hbar c}{(2e)} \end{aligned}$$

を得る。ただし、超伝導体では 2 個の電子がクーパー対を作っているので、$e \to (2e)$ の置き換えを行った。

普通の金属 の円柱殻内部では、マイスナー効果は起こらない。したがって、電流がゼロになる必要はなく、磁束の量子化もおこらず、式 (6) にしたがって金属中を永久電流が流れ続けると考えられる。実際、この金属リング中の永久電流は最近の実験によって観測されれた。ところが、実験で観測された電流は、詳しい計算による理論値よりも二桁も大きな値だったので、多くの物理学者の関心を集めている。[20, 21, 22]。

問26 ポテンシャル $V(x)$ のもとで1次元運動をする粒子を考える。その波動関数は $\exp[iS(x,t)/\hbar]$ で表されると仮定しよう。$S(x,t)$ が、$\hbar$ をある意味で小さいと見なす範囲で、古典的 **ハミルトン－ヤコビの方程式** を満たすことを証明せよ。古典的ハミルトン－ヤコビ方程式の解から出発し $V(x,t)$ をゼロと置くことで、平面波の正しい波動関数が得られることを示せ。この特別な場合に、なぜ厳密解が得られたのであろうか。

［解答］ シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\phi(x)$$

において、$\phi(x,t)=\exp(iS/\hbar)$ とおけば、

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) &= i\hbar\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)=-\frac{\partial S}{\partial t}\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)\\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x}\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)\right]\\
&= \left[-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2\right]\exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)
\end{aligned}$$

となる。両辺を $\exp(iS/\hbar)$ で割って、

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+V(x)=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} \tag{1}$$

を得る。ここまでは、厳密にシュレーディンガー方程式と等価な変形である。ここで、$\hbar$ が小さいとして右辺を無視すると（古典近似）ハミルトン・ヤコビの偏微分方程式

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2+V(x)=0 \tag{2}$$

を得る。エネルギーを E として、変数分離

$$S=W(x)-Et$$

を行って、この偏微分方程式をとくと

$$S=\pm\int dx\sqrt{2mE-V(x)}-Et+\alpha$$

となるので、波動関数

$$\phi(x,t) = C\exp\left(\pm\frac{i}{\hbar}\int dx\sqrt{2mE - V(x)} - \frac{i}{\hbar}Et\right)$$

を得る。ここで、$V(x) = 0$ とおけば、平面波の <u>厳密な</u> 波動関数

$$\phi(x,t) = C\exp\left(\pm\frac{ip}{\hbar}x - \frac{i}{\hbar}Et\right)$$

が導かれる。近似をしたにもかかわらず平面波の厳密な波動関数が得られたのは、$V(x) = 0$ のときは

$$\begin{aligned} S &= \pm px - Et + \alpha \\ \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} &= 0 \end{aligned}$$

となり、式 (1) と式 (2) が厳密に一致するからである。

問27　球座標を用い、**水素原子** の **基底状態** と励起状態に対して、**確率の流れ** $\boldsymbol{j}$ を求めよ。特に $m_l \neq 0$ の状態では、m_l が正か負かに応じて $\boldsymbol{j}$ は ϕ が増加または減少する方向を向き、回転する流れをつくることを示せ。

［解答］　水素原子の基底状態および励起状態の波動関数は

$$\varphi_{nlm}(\boldsymbol{x}\ ) \ = \ R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) = R_{nl}(r)N_{lm}P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}$$

と書ける。N_{lm} は規格化定数である。また、確率の流れは

$$\boldsymbol{j} \ = \frac{\hbar}{2im_e}(\varphi^*\nabla\varphi - \varphi\nabla\varphi^*) = \frac{\hbar}{m_e}\mathrm{Im}(\varphi^*\nabla\varphi)$$

と表される。微分演算子 ∇ の球座標表示

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r}\hat{\boldsymbol{e}}_{\ r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{\boldsymbol{e}}_{\ \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\hat{\boldsymbol{e}}_{\ \phi}$$

を使い、$R_{nl}(r)$ と $P_l^|m|(\cos\theta)$ が実数関数であることを考慮すれば、ただちに確率の流れの r 成分と θ 成分がゼロになることが分かる。

$$\begin{aligned}
j_r &= \frac{\hbar}{2im_e}\left(\varphi^*\frac{\partial\varphi}{\partial r} - \varphi\frac{\partial\varphi^*}{\partial r}\right) = 0 \\
j_\theta &= \frac{\hbar}{2im_e}\left(\varphi^*\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial\theta} - \varphi\frac{1}{r}\frac{\partial\varphi^*}{\partial\theta}\right) = 0 \\
j_\phi &= \frac{\hbar}{2im_e}R_{nl}^2(r)N_{lm}^2\frac{1}{r\sin\theta}(P_l^{|m|}(\cos\theta))^2 \times \left(e^{-im\phi}\frac{\partial e^{im\phi}}{\partial\phi} - e^{im\phi}\frac{\partial e^{-im\phi}}{\partial\phi}\right) \\
&= \left\{\frac{\hbar}{m_e}R_{nl}^2(r)N_{lm}^2\frac{1}{r\sin\theta}(P_l^{|m|}(\cos\theta))^2\right\}m = \frac{\hbar m}{m_e r\sin\theta}|\phi_{nlm}|^2
\end{aligned}$$

よって、ゼロでない確率の流れのベクトル $\boldsymbol{j}$ の成分は ϕ 成分のみで、その大きさは z 軸の回りの **軌道角運動量** の大きさ $m\hbar$ に比例する。このことは、状態 $\varphi_{lmn}(\boldsymbol{x}\ )$ では軌道角運動量の z 成分 $m\hbar$ をもって電子雲が z 軸のまわりを回転していると考えるとわかりやすい。

問２８　１次元の **自由粒子** の **プロパゲーター（グリーン関数）** の表式 (2.5.16)

$$K(x'',t:x',t_0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]$$

を導き、さらに (2.5.16) を３次元へ一般化した表式を求めよ。

［解答］

$$K(x'',t:x',t_0)=\langle x''|\exp\left(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right)|x'\rangle$$

$$=\int dp'\exp\left(-\frac{ip'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\right)\langle x''|p'\rangle\langle p'|x'\rangle$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp'}{2\pi\hbar}\exp\left(\frac{ip'(x''-x')}{\hbar}-\frac{ip'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\right)$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp'}{2\pi\hbar}\exp\left[-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}\left\{\left(p'-\frac{x''-x'}{t-t_0}m\right)^2-\left(\frac{x''-x'}{t-t_0}m\right)^2\right\}\right]$$

$$=\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m(x''-x')^2}{2(t-t_0)}\right]\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp'}{2\pi\hbar}\exp\left[-\frac{i(t-t_0)}{2m\hbar}p'^2\right]$$

ここで、公式

$$\int_0^{\infty}\exp(-i\alpha p'^2)dp'=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{i\alpha}}$$

を使って、

$$K(x'',t:x',t_0)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]$$

を得る。３次元化すると

$$K(\boldsymbol{x}'',t:\boldsymbol{x}',t_0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty}d^3\boldsymbol{p}'\exp\left[\frac{i\boldsymbol{p}'(\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}')}{\hbar}-\frac{i\boldsymbol{p}'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\right]$$

$$=\prod_{i=1}^{3}\int_{-\infty}^{\infty}dp_i'\exp\left[\frac{ip_i'(x_i''-x_i')}{\hbar}-\frac{ip_i'^2(t-t_0)}{2m\hbar}\right]$$

$$=\prod_{i=1}^{3}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im(x_i''-x_i')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{im|\boldsymbol{x}''-\boldsymbol{x}'|^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]$$

問29 **分配関数** を、(2.5.20)-(2.5.22) にあるように

$$Z = \int d^3x' K(\boldsymbol{x}\,', t; \boldsymbol{x}\,', 0)|_{\beta=it/\hbar}$$

で定義する. **基底状態のエネルギー** が

$$-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (\beta \to \infty)$$

の計算から得られることを示せ。1次元の箱の中にある粒子を例にして、このことを説明せよ。

[解答] プロパゲーター $K(\boldsymbol{x}\,', t; \boldsymbol{x}\,', 0)$ をハミルトニアン H の固有ケット $|a'\rangle$ で展開すると

$$\begin{aligned}
&K(\boldsymbol{x}\,', t; \boldsymbol{x}\,', 0) \\
&= \langle \boldsymbol{x}\,'|\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)|\boldsymbol{x}\,'\rangle \\
&= \sum_{a'} \langle \boldsymbol{x}\,'|a'\rangle\langle a'|\boldsymbol{x}\,'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \\
&= \sum_{a'} |\langle \boldsymbol{x}\,'|a'\rangle|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right)
\end{aligned}$$

となるので、問題で定義された

$$\begin{aligned}
Z &= \int d^3\boldsymbol{x}\,' K(\boldsymbol{x}\,', t : \boldsymbol{x}\,', 0)|_{\beta=it/\hbar} \\
&= \sum_{a'} \left(\int d^3\boldsymbol{x}\,'|\langle \boldsymbol{x}\,'|a'\rangle|^2\right) \exp(-\beta E_{a'}) \\
&= \sum_{a'} \exp(-\beta E_{a'})
\end{aligned}$$

は、**統計力学** における分配関数になる。[10] したがって、式

$$-\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{\sum_a E_{a'} \exp(-\beta E_{a'})}{\sum_{a'} \exp(-\beta E_{a'})} \tag{1}$$

は、絶対温度 $T = 1/k_B\beta$ の熱平衡にある系の平均エネルギーをあらわしている。このことから、$\beta \to \infty$ すなわち $T \to 0$ の低温極限をとれば式 (1) が基底状態のエネルギーに近づいてゆくことが、物理的に予想される。

じっさい、上の式の各項 $\exp(-\beta E'_a)$ は、$\beta \to \infty$ とするとき、$E_{a'}$ が大きいほど急激に小さくなるので、

$$\lim_{\beta\to\infty} -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{E_0 \exp(-\beta E_0)}{\exp(-\beta E_0)} = E_0$$

となって、基底状態のエネルギー E_0 が得られる。

1 次元の箱の中にある粒子の場合

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2$$

であるから

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2\right) \\ -\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial \beta} &= \frac{\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}n^2 \exp\left(-\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2\right)}{\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\beta\frac{\hbar^2\pi^2}{2m^2}n^2\right)} \\ &\to \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \ (\text{基底エネルギー}) \quad (\beta \to \infty) \end{aligned} \tag{2}$$

問３０　表式 (2.5.26)

$$K(x'', t; x', t_0) = \langle x'', t | x', t_0 \rangle$$

に類似した運動量空間の **プロパゲータ（グリーン関数）** は $\langle \boldsymbol{p}\,'', t | \boldsymbol{p}\,', t_0 \rangle$ で与えられる。**自由粒子** の場合に $\langle \boldsymbol{p}\,'', t | \boldsymbol{p}\,', t_0 \rangle$ の表式を具体的に導け。

［解答］ **ハイゼンベルク表示の基底ケット** $|\boldsymbol{p}\,'', t\rangle$ 等は、ハイゼンベルク表示の演算子

$$\boldsymbol{p}\ (t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)\ \boldsymbol{p}\quad \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right)$$

の固有ケット

$$|\boldsymbol{p}\,'', t\rangle = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)|p''\rangle$$

として定義されることに注意すれば、

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{p}\,'', t | \boldsymbol{p}\,', t_0 \rangle &= \langle \boldsymbol{p}\,''| \exp\left(-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right)|\boldsymbol{p}\,'\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{iE_{\boldsymbol{p}\,''}(t-t_0)}{\hbar}\right)\langle \boldsymbol{p}\,''|\boldsymbol{p}\,'\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{p}\,''^2(t-t_0)}{2\mu\hbar}\right)\delta^3(\boldsymbol{p}\,''-\boldsymbol{p}\,')\end{aligned}$$

となる。

問3 1

a. **調和振動子** に対する **古典的作用量** の表式を、有限の時間間隔に対して書け。

b. **調和振動子** に対する $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ を、$t_n - t_{n-1} = \Delta t$ が小さいとして **ファインマンの処方箋** を用いて構成せよ。$(\Delta t)^2$ の次数までの項を取り、これが (2.5.18)

$$K(x'', t : x', t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin[\omega(t-t_0)]}}$$
$$\exp\left[\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin[\omega(t-t_0)]}\right\}\{(x''^2 + x'^2)\cos[\omega(t-t_0)] - 2x''x'\}\right]$$

で与えられたプロパゲーターの $t - t_0 \to 0$ とした極限と一致することを示せ。

［解答］

a. 時刻 t_1 に $x_1 = x(t_1)$、時刻 t_2 に $x_2 = x(t_2)$ をとおる古典的調和振動子の解

$$\begin{aligned} x(t) &= A\cos\omega(t-t_1) + B\sin\omega(t-t_1) \\ \dot{x}(t) &= -A\omega\sin\omega(t-t_1) + B\omega\cos\omega(t-t_1) \\ A &= x_1, \quad A\cos\omega T + B\sin\omega T = x_2 \end{aligned}$$

を代入してラグランジュアンを時間積分することで有限の時間間隔 $T = t_2 - t_1$ に対する古典的作用量が求められる。

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_1}^{t_2} dt L(x,\dot{x}) = \int_{t_1}^{t_2}\left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right) \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\int_{t_1}^{t_2} dt\left\{[-A\sin\omega(t-t_1) + B\cos\omega(t-t_1)]^2\right. \\ &\quad \left. - [A\cos\omega(t-t_1) + B\sin\omega(t-t_1)]^2\right\} \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\int_0^T dt\left\{[-A\sin\omega t + B\cos\omega t]^2 - [A\cos\omega t + B\sin\omega t]^2\right\} \\ &= \frac{m\omega^2}{2}\int_0^T dt\left[(B^2 - A^2)\cos 2\omega t - 2AB\sin 2\omega t\right] \\ &= \frac{m\omega}{2}\sin\omega T\left[(B^2 - A^2)\cos\omega T - 2AB\sin\omega T\right] \end{aligned}$$

ここで、

$$B^2 - A^2 = \left(\frac{x_2 - x_1\cos\omega T}{\sin\omega T}\right)^2 - x_1^2$$
$$= \frac{1}{\sin^2\omega T}\left[x_2^2 + x_1^2(\cos^2\omega T - \sin^2\omega T) - 2x_1x_2\cos\omega T\right]$$
$$AB = x_1\frac{x_2 - x_1\cos\omega T}{\sin\omega T}$$

を代入して、

$$S = \frac{m\omega}{2\sin\omega T}\left[(x_1^2 + x_2^2)\cos\omega T - 2x_1x_2\right] \qquad (1)$$

をえる。

b. まず、ファインマンの処方箋にしたがって $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}\rangle$ を構成しよう。式 (1) より、$(\Delta t)^2$ までとって

$$S(n, n-1) = \frac{m}{2\Delta t}\left[x_n^2 - 2x_nx_{n-1} + x_{n-1}^2 - \frac{\omega^2}{2}(x_n^2 + x_{n-1}^2)(\Delta t)^2\right]$$

となるので、

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[\Delta t\left\{\frac{m}{2}\left[\frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t}\right]^2 - \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{x_n + x_{n-1}}{2}\right)^2\right\}\right]\right\}$$

を得る。

一方、プロパゲーターの方は

$$K(x_n, t_n : x_{n-1}, t_{n-1})$$
$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega\Delta t)}}\exp\left[\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin(\omega\Delta t)}\right\}\{(x_n^2 + x_{n-1}^2)\cos(\omega\Delta t) - 2x_nx_{n-1}\}\right]$$
$$\approx \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\Delta t\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{x_n - x_{n-1}}{\Delta t}\right)^2 - \frac{1}{2}m\omega^2\left(\frac{x_n^2 + x_{n-1}^2}{2}\right)^2\right\}\right]$$

したがって、$\Delta t \to 0$ のとき $K(x_n, t_n : x_{n-1}, t_{n-1}) = \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}\rangle$ となる。

問３２　**シュウィンガーの作用量原理** (Finkelstein[12],p.155 を参照) を述べよ。シュウィンガーの原理を積分することによって $\langle x_2, t_2|x_1, t_1\rangle$ の解を求め、これに対応する $\langle x_2, t_2|x_1, t_1\rangle$ に対する **ファインマン** の表式と比較せよ。二つの表式の古典的極限について述べよ。

［解答］シュウィンガーの作用原理は、量子力学的ラグランジアン L から

$$\delta\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle x_2t_2|\delta\int_{t_1}^{t_2} Ldt|x_1t_1\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle x_2t_2|\delta W_{21}|x_1t_1\rangle$$

という条件によって $\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle$ が決まる、という原理である。詳しくは、文献 [12] を参照せよ。

(x_1, t_1) から (x_2, t_2) への作用量演算子 W_{21} の「well-orderd form」を $\delta w_{21} = \delta W_{21}$ とすると、

$$\begin{aligned}
\delta\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle &= \frac{i}{\hbar}\langle x_2t_2|\delta W_{21}|x_1t_1\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle x_2t_2|\delta w_{21}|x_1t_1\rangle \\
&= \delta w'_{21}\frac{i}{\hbar}\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle \\
\delta\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle &= \frac{\delta\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle}{\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle} = \frac{i}{\hbar}\delta w'_{21}
\end{aligned}$$

となるので、$\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle$ の解は

$$\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}w'_{21}\right] \tag{1}$$

となる。演算子 w は、演算子版ハミルトン・ヤコビの方程式

$$H\left(\frac{\partial w}{\partial x}, \cdots; x, \cdots\right) + \frac{\partial w}{\partial t} = 0$$

を満たす [12]。古典極限 $\hbar \to 0$ では演算は交換可能になり、古典的ハミルトン・ヤコビの方程式が復活する。したがって、w_{21} は古典作用量 S_{21} となって、

$$\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{21}\right] \tag{2}$$

を得る。ただし、S_{21} は古典的作用量である。

これに対応するファインマンの表式は

$$\langle x_2t_2|x_1t_1\rangle = \sum_{\text{経路}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}S_{21}\right] \tag{3}$$

である。古典極限では古典軌道のまわりの経路のみが重要な寄与をするので式 (2) となる。

$\langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle$ に対する二つの表式のうち、式 (1) では作用量を演算子として扱うことで量子効果を表しているのに対し、式 (3) では経路の和として表現している。古典極限をとれば、どちらの表式も式 (2) となる。

問３３　2.6 節で議論した **重力** が誘起する干渉の問題を波動力学によって調べても、(2.6.17) の **位相差** の表式

$$\delta\phi = -\frac{m^2 g l_1 l_2 \lambda\!\!\!- \sin\delta}{\hbar^2}$$

が導けることを示せ。

［解答］　エネルギー保存則

$$\frac{\boldsymbol{p}^{\,2}}{2m} + mgz = E$$

より、

$$\begin{aligned} z = 0 \text{ の時} \quad p_{AC} &= \hbar k_1 = \sqrt{2mE} \\ z = l_2 \text{ の時} \quad p_{BD} &= \sqrt{2mE - 2m^2 g l_2 \sin\delta} = \hbar k_2 \end{aligned}$$

位相差は

$$\Delta\phi = (k_2 - k_1) l_1 \approx -\frac{m^2 g l_1 l_2 \lambda\!\!\!- \sin\delta}{\hbar^2}$$

となる。

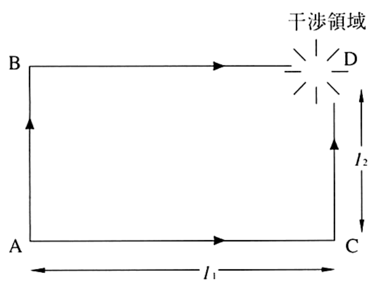


図 2.1: 重力が引き起こす量子的干渉を検出する実験

問3 4

a. 力学的運動量 Π の交換関係 (2.6.25)

$$[\Pi_i, \Pi_j] = \left(\frac{i\hbar e}{c}\right)\epsilon_{ijk}B_k$$

と量子力学的な **ローレンツ力** の表式 (2.6.27)

$$m\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = \frac{d\Pi}{dt} = e\left[\boldsymbol{E} + \frac{1}{2c}\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right)\right]$$

を確かめよ。

b. 確率の流れ の表式 (2.6.31)

$$\boldsymbol{j} = \left(\frac{\hbar}{m}\right)\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi) - \left(\frac{e}{mc}\right)\boldsymbol{A}\,|\psi|^2$$

で与えられる $\boldsymbol{j}$ を用い、連続方程式 (2.6.30)

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0$$

を確かめよ。

［解答］

a. ハミルトニアンが

$$H = \frac{\left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{2m} + e\phi(\boldsymbol{x})$$

であるとすれば、力学的運動量 Π は

$$\Pi_i = m\frac{dx_i}{dt} = \frac{m}{i\hbar}\left[x_i, \frac{\left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{2m}\right] = \frac{\partial\left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2}{\partial p_i} = \left(\boldsymbol{P} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)_i$$

で与えられる。運動量演算子が位置座標表示で微分演算子 $-i\hbar\nabla$ となるので、

$$\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = -i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$$

$$
\begin{aligned}
&= [-i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})] + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot[-i\hbar\nabla] \\
&= (\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{P}
\end{aligned}
$$

と書けることに注意して

$$
\begin{aligned}
&[\Pi_i, \Pi_j] \\
&= \left[P_i - \frac{eA_i}{c}, P_j - \frac{eA_j}{c}\right] \\
&= [P_i, P_j] - \left(\frac{e}{c}\right)[A_i, P_j] - \left(\frac{e}{c}\right)[P_i, A_j] + \left(\frac{e}{c}\right)^2 [A_i, A_j] \\
&= -\left(\frac{e}{c}\right)[A_iP_j - P_jA_i + P_iA_j - A_jP_i] \\
&= -\left(\frac{e}{c}\right)[A_iP_j - (P_jA_i) - A_iP_j + (P_iA_j) + A_jP_i - A_jP_i] \\
&= -\left(\frac{e}{c}\right)[(P_iA_j) - (P_jA_i)] \\
&= -\left(\frac{e}{c}\right)\frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial A_j}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial x^j}\right) \\
&= \left(\frac{i\hbar e}{c}\right)\epsilon_{ijk}B_k
\end{aligned}
$$

を得る。よって

$$
\begin{aligned}
m\frac{d^2x_i}{dt^2} &= \frac{d\Pi_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\Pi_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[\Pi_i, \frac{\Pi^2}{2m} + e\phi\right] \\
&= \frac{e}{i\hbar}[\Pi_i, \phi] + \frac{1}{2i\hbar m}\sum_j[\Pi_i, \Pi_j^2] \\
&= \frac{e}{i\hbar}[P_i, \phi] + \frac{1}{2i\hbar m}\sum_j([\Pi_i, \Pi_j]\Pi_j + \Pi_j[\Pi_i, \Pi_j]) \\
&= -e\frac{\partial\phi}{\partial x^i} + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)(\epsilon_{ijk}B_k\Pi_j + \epsilon_{ijk}\Pi_jB_k) \\
&= e\left[E_i + \frac{1}{2c}\left(\epsilon_{ijk}\frac{\Pi_j}{m}B_k - \epsilon_{ijk}B_k\frac{\Pi_j}{m}\right)\right] \\
&= e\left[\boldsymbol{E} + \frac{1}{2c}\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right)\right]_i
\end{aligned}
$$

b. シュレーディンガー方程式とその複素共役の式

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= H\psi(\boldsymbol{x}) \\
-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= H\psi^*(\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

を使うと

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{\partial\psi^*\psi}{\partial t} = \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \\ &= \frac{1}{i\hbar}(\psi^* H\psi - \psi H\psi^*) \\ &= \frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}(\psi^* H\psi)\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$\begin{aligned}&\psi^* H\psi \\ &= \psi^*\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \left(\frac{e}{c}\right)\boldsymbol{A}\ \right)^2 + e\phi\right]\psi \\ &= \psi^*\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)(\boldsymbol{A}\ \nabla + \nabla\boldsymbol{A}\ ) + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)^2\boldsymbol{A}\ ^2 + e\phi\right]\psi \\ &\psi H\psi^* \\ &= \psi\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)(\boldsymbol{A}\ \nabla + \nabla\boldsymbol{A}\ ) + \frac{1}{2m}\left(\frac{e}{c}\right)^2\boldsymbol{A}\ ^2 + e\phi\right]\psi^*\end{aligned}$$

を代入すれば

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho}{\partial t} &= \frac{-\hbar}{2im}\nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) + \left(\frac{e}{mc}\right)\nabla\cdot(\psi^*\boldsymbol{A}\ \psi) \\ &= -\nabla\cdot\boldsymbol{j}\end{aligned}$$

を得る。

問３５　電荷 e を持ちスピンを持たない１粒子のハミルトニアンを考える。静磁場があるとき、場との相互作用の項は $\boldsymbol{A}$ を適切な **ベクトルポテンシャル** として、

$$\boldsymbol{p}_{\text{演算子}} \to \boldsymbol{p}_{\text{演算子}} - \frac{e\boldsymbol{A}}{c}$$

の置き換えにより作られる。簡単のために磁場 $\boldsymbol{B}$ は一様で $z-$ 軸の正方向を向いているとする。上記の処方により実際、磁場 $\boldsymbol{B}$ と **軌道磁気モーメント** $(e/2mc)\boldsymbol{L}$ との相互作用の正しい表式が導けることを証明せよ。この他に、$B^2(x^2+y^2)$ に比例する項もある事を示し、その物理的意味に関し簡単に述べよ。

［解答］　磁場 $\boldsymbol{B} = (0,0,B)$ を与えるベクトルポテンシャルとして

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r} = \frac{B}{2}(-y,x,0)$$

をとる。この **ゲージ** では、$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$ であるから、$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}$ を $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ で置き換えられること（教科書 5.3.21 式）に注意して、ハミルトニアンを展開すれば

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \\
&= \frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p}^2 - 2\frac{e}{c}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}) + \left(\frac{e}{c}\right)^2\boldsymbol{A}^2\right] \\
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{p} + \frac{m}{2}\left(\frac{e}{mc}\right)^2\frac{B^2}{4}(x^2+y^2) \\
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{p} + \frac{m}{2}\omega^2(x^2+y^2) \\
&= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} - \frac{e}{2mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2+y^2)
\end{aligned}$$

が導かれる。ただし、$\omega = |Be|/2mc$ と置いた。

L_z に比例する項は軌道運動による常磁性をあたえる。x^2+y^2 に比例する項は、一般に値は小さいが $\langle\boldsymbol{L}\rangle = 0$ のときに効いてきて **反磁性** を与える。第５章の問１８と問１９も参照せよ。

問３６　１個の電子が $z-$ 方向を向いた一様な磁場 ($\boldsymbol{B} = B\hat{z}$) の中を運動している。
a. $[\Pi_x, \Pi_y]$ を計算せよ。ただし

$$\Pi_x \equiv p_x - \frac{eA_x}{c}, \quad \Pi_y \equiv p_y - \frac{eA_y}{c}$$

とする。

b. ハミルトニアンと (a) で得られた交換関係を、１次元振動子の問題と比較することによって、エネルギー固有値がただちに

$$E_{k,n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(\frac{|eB|\hbar}{mc}\right)\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

のように表されることを示せ。ここで $\hbar k$ は p_z 演算子の連続固有値で、n はゼロを含む負でない整数である。

［解答］
a. 問３４より

$$[\Pi_x, \Pi_y] = \left(\frac{i\hbar e}{c}\right)\epsilon_{12k}B_k = \left(\frac{i\hbar e}{c}\right)B_3 = \left(\frac{i\hbar e}{c}\right)B \tag{1}$$

となる。

b. 電磁ポテンシャルを

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A} &= \frac{B}{2}(-y, x, 0) \\ \phi &= 0 \end{aligned}$$

にとって、電子のスピンを無視すれば、ハミルトニアンは

$$H = H_z + H_{xy} \tag{2}$$

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m} \tag{3}$$

$$H_{xy} = \frac{1}{2m}(\Pi_x^2 + \Pi_y^2) \tag{4}$$

のように、z 座標のみを含む部分 H_z と x 座標と y 座標を含む部分 H_{xy} に分離できる。したがって、全ハミルトニアン H の固有ケット $|k, n\rangle_{tot}$ は

$$|k, n\rangle_{tot} = |k\rangle_z \otimes |n\rangle_{xy} \tag{5}$$

のような直積の形に書ける。したがって、部分ハミルトニアンに対する固有方程式

$$
\begin{aligned}
H_z|k\rangle &= E_z|k\rangle \qquad (6)\\
H_{xy}|n\rangle &= E_{xy}|n\rangle \qquad (7)
\end{aligned}
$$

の解が求められれば、全ハミルトニアンに対する固有ケットは式 (5) で与えられ、固有エネルギーは $E_{tot} = E_z + E_{xy}$ となる。

部分ハミルトニアン H_z は、1 次元の自由粒子のハミルトニアンと同じ形をしているので、エネルギー固有ケットは **正準運動量演算子** p_z の固有ケット

$$p_z|k\rangle = \hbar k|k\rangle$$

であり、エネルギー固有値は

$$E_z = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

であることがただちに分かる。

つぎに、部分ハミルトニアン H_{xy} は、式 (4) と設問 **a.** の結果 (1) より、

$$
\begin{aligned}
H_{xy} &= \frac{\Pi_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\Pi_y^2\\
[\Pi_x, \Pi_y] &= \left(\frac{eB}{c}\right) i\hbar
\end{aligned}
$$

という形をしており、1 次元調和振動子のハミルトニアン

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\\
[x, p] &= i\hbar
\end{aligned}
$$

と比較して

$$
\begin{aligned}
\Pi_x &\to p\\
\Pi_y &\to m\omega x \qquad (8)\\
\frac{eB}{mc} &\to \omega
\end{aligned}
$$

という対応関係が存在する。そこで、部分ハミルトニアン H_{xy} は、調和振動子と同じタイプのエネルギースペクトルを持つ。じっさい、「**生成消滅**

演算子」を

$$
\begin{aligned}
a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\Pi_x - i\Pi_y) \\
a &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\Pi_x + i\Pi_y)
\end{aligned}
$$

で定義すれば、**生成消滅演算子の交換関係**

$$
[a, a^\dagger] = 1 \tag{9}
$$

が成り立つ。また、「**個数演算子**」$N = a^\dagger a$ を定義すれば、

$$
\begin{aligned}
N &= a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(\Pi_x^2 + \Pi_y^2 + i[\Pi_x, \Pi_y]\right) \\
&= \frac{1}{\hbar\omega}H_{xy} - \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

となるので、

$$
\begin{aligned}
H_{xy} &= \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right) \\
\omega &= \frac{|eB|}{mc}
\end{aligned}
$$

と書ける。交換関係 (9) を使って、調和振動子と同じ議論をすれば、ハミルトニアン H_{xy} のエネルギー固有値

$$
E_{xy} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{\hbar|eB|}{mc}\left(n + \frac{1}{2}\right)
$$

を得る。ただし、n は負でない整数である。

以上まとめると、全ハミルトニアンのエネルギー固有値は

$$
E_{tot} = E_{k,n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(\frac{|eB|\hbar}{mc}\right)\left(n + \frac{1}{2}\right)
$$

のように表される。ここで $\hbar k$ は p_z 演算子の連続固有値で、n はゼロを含む負でない整数である。

調和振動子との対応関係 (8) より、磁場中の粒子は

$$
\begin{aligned}
\Pi_x(t) &= A\cos\omega t \\
\Pi_y(t) &= A\sin\omega t
\end{aligned}
$$

のように xy 方向に円運動していることがわかる。

問３７　**中性子干渉計** を考える。計数率に現れる極大値間の間隔に相当する磁場の差は、l を磁場中の経路の長さとして

$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{|e|g_n\bar{\lambda}\, l}$$

で与えられることを示せ(図を参照)。
ここで $g_n(=-1.91)$ は $-e\hbar/(2m_n c)$ を単位にした、中性子の **磁気モーメント** である。［この問題を読者が１９６７年に解いていたなら、結果を *Physical Review Letters* に出版できたであろう。！］

［解答］　磁場の方向を z 軸に取ると、ハミルトニアンは

$$H = \omega S_z, \qquad \omega = \frac{g_n e B}{m_n c}$$

となる。S_z の固有ケット $|S_z;\pm\hbar/2\rangle$ を基底にとると時間発展演算子は

$$U(T) = \exp\left(-i\frac{H}{\hbar}T\right) = \exp\left(-i\frac{\omega T}{2}\sigma_z\right) \doteq \begin{pmatrix} e^{-i\omega T/2} & 0 \\ 0 & e^{+i\omega T/2} \end{pmatrix}$$

となる。ただし、時間

$$T = \frac{l}{p/m_n} = \frac{l}{\hbar/m_n\bar{\lambda}} = \frac{l m_n \bar{\lambda}}{\hbar}$$

は中性子が磁場 $\boldsymbol{B}$ が存在する領域を通過する時間である。

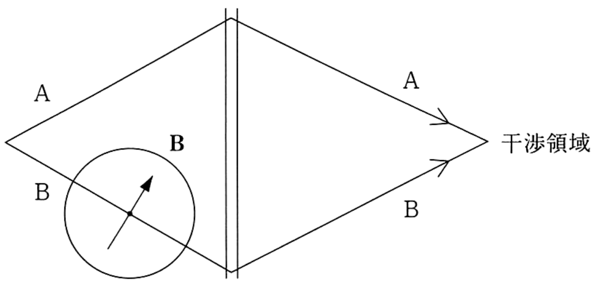


図 2.2: 中性子の干渉実験

干渉領域でのケット $|\beta\rangle$ は、

$$|\beta\rangle = C(|\alpha\rangle + U(T)|\alpha\rangle) = C(\mathbf{I} + U(T))|\alpha\rangle$$

であるから、強度は

$$\begin{aligned}
\langle\beta|\beta\rangle &= |C|^2\langle\alpha|(\mathbf{I} + U^{-1}(T))(\mathbf{I} + U(T))|\alpha\rangle \\
&= |C|^2\langle\alpha|(2\mathbf{I} + U(-T) + U(T))|\alpha\rangle \\
&= 2|C|^2\langle\alpha|1 + \cos(\omega T/2)|\alpha\rangle \\
&= 2|C|^2(1 + \cos(\omega T/2))\langle\alpha|\alpha\rangle \\
&= 4|C|^2\cos^2(\omega T/4)
\end{aligned}$$

となる。したがって、極大値間の磁場の差 ΔB は条件

$$\frac{T\Delta\omega}{4} = \frac{Tg_n e\Delta B}{4m_n c} = \pi$$

より、

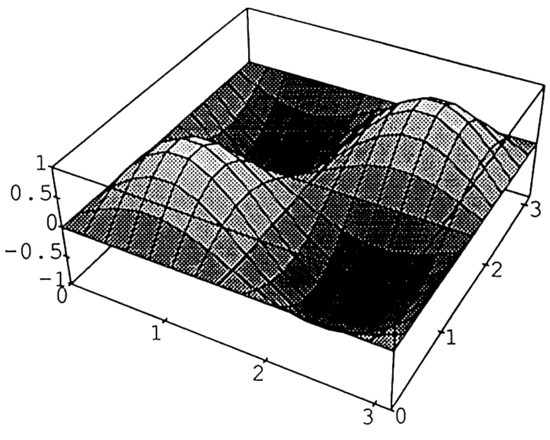
$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{|e|g_n\lambda\!\!\!- l}$$

で与えられる。

【Q＆A】 どこに行ったの中性子？
Q：$T = 2\pi/\omega$ のとき、磁場を通った振幅と通らない振幅の符号が正反対になって干渉領域で打ち消し合ってゼロになり、中性子は観測されない。中性子はどこへ消えたのであろうか？
A：？？？

第 3 章

角運動量の理論



問 1　$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ の固有値と固有ベクトルを求めよ。
1 個の電子が $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ のスピン状態にあるとせよ。s_y を測定したとき、結果が $(\hbar/2)$ である確率はいくらか。

［解答］　S_z の固有ケット $|+\rangle$、$|-\rangle$ を基底として行列表示する。固有値を λ、固有ケットを $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ とおくと、

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

固有方程式

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0$$

より、固有値 $\lambda = \pm 1$ を得る。規格化した固有ケットは、$\lambda = +1$ のとき

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +1 \\ i \end{pmatrix}$$

$\lambda = -1$ のとき

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ i \end{pmatrix}$$

となる。

スピン状態 $|a\rangle \doteq \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ にある電子を測定して $S_y = +\hbar/2$ となる確率 $P(S_y = +\hbar/2)$ は

$$\begin{aligned} P(S_y = +\hbar/2) &= |\langle S_y; +|a\rangle|^2 \\ &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}}(1, -i) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \right|^2 \\ &= \frac{1}{2}(\alpha - i\beta)(\alpha^* + i\beta^*) \end{aligned}$$

となる。

問 2　a_0 を実数、$\boldsymbol{a}$ を実数を成分とする 3 次元ベクトルとするとき

$$U = \frac{a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}}{a_0 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}}$$

で定義される 2×2 行列を考える。
a. U がユニタリーかつユニモジュラーであることを証明せよ。

b. 一般に 2×2 **ユニタリー・ユニモジュラー行列** は、3 次元での **回転** を表す。U に対応する回転軸と回転角を、a_0,a_1,a_2 および a_3 を用いて求めよ。

［解答］
a. 行列 U の **エルミート共役行列** は

$$U^\dagger = \frac{a_0 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}}{a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}}$$

であるから、

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1$$

となり、行列 U はユニタリーである。

また、行列 U の行列式は

$$|U| = \left|\frac{a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}}{a_0 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}}\right| = \frac{|a_0 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}|}{|a_0 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}|} = 1$$

であるから、行列 U はユニモジュラーである。ただし、分母分子それぞれの行列式 Δ がともに

$$\begin{aligned}
\Delta &= |a_0 \pm i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{a}| \\
&= \begin{vmatrix} a_0 \pm ia_z & \pm(ia_x + a_y) \\ \pm(ia_x - a_y) & a_0 \mp ia_z \end{vmatrix} \\
&= a_0^2 + a_x^2 + a_y^2 + a_z^2 = a_0^2 + \boldsymbol{a}^2
\end{aligned}$$

となることを用いた。

b. U の行列要素を計算しよう。

$$\begin{aligned}
U &= \begin{pmatrix} a_0 + ia_z & ia_x + a_y \\ ia_x - a_y & a_0 - ia_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 - ia_z & -ia_x - a_y \\ -ia_x + a_y & a_0 + ia_z \end{pmatrix}^{-1} \\
&= \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} a_0^2 - |\boldsymbol{a}|^2 + 2ia_0a_z & 2ia_0a_x + 2a_0a_y \\ 2ia_0a_x - 2a_0a_y & a_0^2 - |\boldsymbol{a}|^2 - 2ia_0a_z \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

教科書の式 (3.3.10) より、

$$\mathrm{Re}(U_{11}) = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \qquad \mathrm{Im}(U_{11}) = -n_z \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$
$$\mathrm{Re}(U_{12}) = -n_y \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad \mathrm{Im}(U_{12}) = -n_x \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

であるから、回転角は

$$\theta = 2\arccos\left(\frac{a_0^2 - |\boldsymbol{a}\,|^2}{a_0^2 + |\boldsymbol{a}\,|^2}\right)$$

回転軸は

$$\hat{\boldsymbol{n}} \;=\left(\frac{a_x}{|\boldsymbol{a}\,|}, \frac{a_y}{|\boldsymbol{a}\,|}, \frac{a_z}{|\boldsymbol{a}\,|}\right)$$

となる。

問 3　z- 方向に磁場があるときの、電子・陽電子系（**ポジトロニウム**）の **スピンに依存するハミルトニアン** は

$$H = A\boldsymbol{S}^{(e-)} \cdot \boldsymbol{S}^{(e+)} + \left(\frac{eB}{mc}\right)(S_z^{(e-)} - S_z^{(e+)})$$

と書ける。この系の **スピン関数** は $\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)}$ で与えられるとする。

a. この関数は、$A \to 0$, $(eB/mc) \neq 0$ の極限で H の固有関数であるか。もしそうならば、エネルギー固有値を求めよ。もしそうでなければ、H の期待値を求めよ。

b. 同じ問題を $(eB/mc) \to 0, A \neq 0$ の極限で考えよ。

［解答］

a. 与えられたスピン関数は、H の固有関数である。ハミルトニアン

$$H = \left(\frac{eB}{mc}\right)(S_z^{(e-)} - S_z^{(e+)})$$

にスピン関数 $\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)}$ を作用させると

$$H\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)} = \left(\frac{eB}{mc}\right)(S_z^{(e-)} - S_z^{(e+)})\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)} = \hbar\left(\frac{eB}{mc}\right)\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)}$$

となって、固有値 $E = \hbar eB/mc$ の固有関数になっている。

b. 与えられたスピン関数は、H の固有関数ではない。ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H &= A\boldsymbol{S}^{(e-)} \cdot \boldsymbol{S}^{(e+)} \\ &= A(S_z^{(e-)}S_z^{(e+)} + \frac{1}{2}S_+^{(e-)}S_-^{(e+)} + \frac{1}{2}S_-^{(e-)}S_+^{(e+)}) \end{aligned}$$

にスピン関数 $\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)}$ を作用させると

$$H\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)} = A\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2(-\chi_+^{(e-)}\chi_-^{(e+)} + 0 + 2\chi_-^{(e-)}\chi_+^{(e+)})$$

となって、固有関数にはならない。期待値をもとめると

$$\langle H \rangle = -A\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

となる。

問 4　スピン 1 の粒子を考える。$S_z(S_z+\hbar)(S_z-\hbar)$ および $S_x(S_x+\hbar)(S_x-\hbar)$ の行列要素を計算せよ。

［解答］

S_z の固有ケット

$$S_z|m\rangle = m\hbar|m\rangle, \qquad \text{ただし、} m=-1,0,+1$$

を基底にとって考える。S_z,$(S_z+\hbar)$,$(S_z-\hbar)$ のうちどれかが 0 になるので、行列要素

$$\langle m'|S_z(S_z+\hbar)(S_z-\hbar)|m\rangle$$

は常に 0 になる。したがって、演算子 $S_z(S_z+\hbar)(S_z-\hbar)$ は零演算子である。

$S_x(S_x+\hbar)(S_x-\hbar)$ についても、S_x の固有ケットを基底にとって同様に零演算子であることが証明できる。零演算子を扱った、第 1 章問題 7 の (a.) を参照。

問 5　剛体のハミルトニアンを

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{K_1^2}{I_1} + \frac{K_2^2}{I_2} + \frac{K_3^2}{I_3}\right)$$

とする。ここで $\boldsymbol{K}$ は **剛体座標系での角運動量** である。この表式より $\boldsymbol{K}$ に対する **ハイゼンベルクの運動方程式** を求め、対応極限で **オイラーの運動方程式** を見いだせ。

［解答］

剛体座標系での 回転 は、静止座標系での逆回転と等価である。したがって、$\boldsymbol{J} \rightarrow -\boldsymbol{K}$ の置き換えによって、剛体座標系での角運動量 $\boldsymbol{K}$ の **交換関係**

$$[K_i, K_j] = -\sum_k i\hbar\epsilon_{ijk}K_k$$

を得る。これを用いてハイゼンベルクの運動方程式を求めよう。

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{dK_i}{dt} &= [K_i, H] \\
&= \sum_j \frac{1}{2I_j}\,[K_i, K_j^2] \\
&= \sum_j \frac{1}{2I_j}\,\{K_j[K_i, K_j] + [K_i, K_j]K_j\} \\
&= -\sum_{jk} \frac{i\hbar}{2I_j}\epsilon_{ijk}\,\{K_jK_k + K_kK_j\}
\end{aligned}$$

両辺を $i\hbar$ で割って、古典対応極限 $\hbar \rightarrow 0$ で角運動量の成分どうしが交換可能になる $([K_j, K_k] \rightarrow 0)$ ことを用いれば、

$$\begin{aligned}
\frac{dK_i}{dt} &= -\sum_{jk} \frac{1}{2I_j}\epsilon_{ijk}\,\{K_jK_k + K_kK_j\} \\
&= -\sum_{jk} \epsilon_{ijk}\frac{K_j}{I_j}K_k
\end{aligned}$$

となって、オイラーの運動方程式を得る。

> 問 6　(α, β, γ) を **オイラー角** として、$U = e^{iG_3\alpha}e^{iG_2\beta}e^{iG_3\gamma}$ と置く。U が回転 (α, β, γ) を表すために、G_k の満足する **交換関係** は何か。$\boldsymbol{G}$ と **角運動量演算子** と比較せよ。

[解答] 教科書の式 (3.3.19) より、オイラー角 (α, β, γ) に対する **回転演算子** $R(\alpha, \beta, \gamma)$ は

$$
\begin{aligned}
R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) \\
&= e^{-iJ_z\alpha/\hbar}e^{-iJ_y\beta/\hbar}e^{-iJ_z\gamma/\hbar}
\end{aligned}
$$

と書けるので、

$$
U = e^{iG_3\alpha}e^{iG_2\beta}e^{iG_3\gamma}
$$

と比較して G_k は

$$
\begin{aligned}
G_k &= -\frac{J_k}{\hbar} \\
[G_i, G_j] &= -i\epsilon_{ijk}G_k
\end{aligned}
$$

となる。

問 7　**A** の 3 成分が行列であるとき、次の等式

$$U^{-1}A_kU=\sum_l R_{kl}A_l$$

の意味は何か。この等式より、**行列要素** $\langle m|A_k|n\rangle$ が、ベクトルのように変換することを示せ。

［解答］　**ユニタリー演算子** U を **回転演算子** とすれば、A_k は 3 つの成分をもつベクトル演算子（例えばスピン 1 のスピン演算子）の第 k 成分である。

回転 R 後の状態ケットを

$$|m\rangle_R = U|m\rangle$$
$$|n\rangle_R = U|n\rangle$$

とすれば、**双対対応** より

$$\begin{aligned} {}_R\langle m| &= \langle m|U^\dagger = \langle m|U^{-1} \\ {}_R\langle n| &= \langle n|U^\dagger = \langle n|U^{-1} \end{aligned}$$

となるので

$$\begin{aligned} {}_R\langle m|A_k|n\rangle_R &= \langle m|U^{-1}A_kU|m\rangle \\ &= \sum_l R_{kl}\langle m|A_l|n\rangle \end{aligned}$$

となって、行列要素 $\langle m|A_k|n\rangle$ はベクトルのように変換する。（問 1 3 も参照せよ）

問 8　次式で表される一連の **オイラーの回転** を考える：

$$
\begin{aligned}
& \mathcal{D}^{(1/2)}(\alpha,\beta,\gamma) \\
= & \exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right)\exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right) \\
= & \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2}\sin(\beta/2) \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2}\sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2}\cos(\beta/2) \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

回転が群の性質を持つことから、この一連の操作はある軸の回りの、角度 θ だけの単一の回転と同値であることが期待される。角度 θ を求めよ。

［解答］　教科書上巻 229 頁、式 (3.3.10) より、**ユニタリー・ユニモジュラー行列**

$$
U(a,b) = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a* \end{pmatrix}
$$

は、ベクトル $\hat{\boldsymbol{n}} = (n_x, n_y, n_z)$ を軸とした角度 θ の回転を表す。ただし、$\hat{\boldsymbol{n}}$ と θ は

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Re}(a) &= \cos\left(\frac{\theta}{2}\right), \qquad & \mathrm{Im}(a) &= -n_z\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\
\mathrm{Re}(b) &= -n_y\sin\left(\frac{\theta}{2}\right), & \mathrm{Im}(b) &= -n_x\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)
\end{aligned}
$$

で与えられる。

よって、

$$
\begin{aligned}
\cos\frac{\theta}{2} &= \mathrm{Re}\left(e^{-i(\alpha+\gamma)/2}\cos\frac{\beta}{2}\right) \\
&= \cos\frac{\alpha+\gamma}{2}\cos\frac{\beta}{2} \\
\theta &= 2\times\arccos\left(\cos\frac{\alpha+\gamma}{2}\cos\frac{\beta}{2}\right)
\end{aligned}
$$

となる。

問 9

a. スピン 1/2 の同一粒子からなる系の、 **純粋アンサンブル** を考える。**スピン** 1/2 **の系** $\langle S_x\rangle$ と $\langle S_z\rangle$ の期待値、および $\langle S_y\rangle$ の符号が分かっているとしよう。状態ベクトルをどのように決めたらよいか示せ。$\langle S_y\rangle$ の大きさを知る必要がないのはなぜか。

b. スピン 1/2 の系の **混合アンサンブル** を考える。 **アンサンブル平均**、 $[S_x]$,$[S_y]$,$[S_z]$ はすべて分かっているとする。このアンサンブルを記述する 2×2 **密度行列** を、どのように作ったらよいか示せ。

［解答］

a. 純粋アンサンブルは単一のケット

$$|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle = e^{-i\alpha/2}\cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + e^{i\alpha/2}\sin\frac{\beta}{2}|-\rangle$$

で表されるので、実数 α と β を決定すればよい。未知数が 2 つなので基本的に必要なデータは $\langle S_x\rangle$ と $\langle S_z\rangle$ の 2 つである。なぜ、$\langle S_y\rangle$ の符号が必要なのか見てみよう。$\boldsymbol{S}$ の各成分の期待値は

$$\langle\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|S_x|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\alpha\sin\beta \tag{1}$$

$$\langle\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|S_y|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\alpha\sin\beta \tag{2}$$

$$\langle\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|S_z|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\beta \tag{3}$$

となる。

条件 $0\le\beta<\pi$ に気をつければ、式 (3) を使って $\langle\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|S_z|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle$ から β の値が決まる。すると、式 (1) を使って $\langle\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|S_x|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle$ から $\cos\alpha$ の値が決まる。しかし、角度 α の値の範囲は $0\le\alpha<2\pi$ であるから、$\cos\alpha$ の値からだけでは α の値は 1 つに決まらない。そこで、2 つの可能な α の値から 1 つを選ぶために、$\sin\alpha$ の符号、すなわち $\langle\hat{\boldsymbol{n}}\,;+|S_y|\hat{\boldsymbol{n}}\,;+\rangle$ の符号を知る必要がある。

b. 密度行列は $\mathrm{tr}(\rho)=1$ を満たすエルミート演算子なので、実数 a,b,c を用いて

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2+a & b-ic \\ b+ic & 1/2-a \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\mathbf{I} + a\sigma_z + b\sigma_x + c\sigma_y$$

と書ける。

第 1 章の問 2 の a. より

$$
\begin{aligned}
[S_x] &= \mathrm{tr}(\rho S_x) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{tr}(\rho\sigma_x) = \hbar b \\
[S_y] &= \mathrm{tr}(\rho S_y) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{tr}(\rho\sigma_y) = \hbar c \\
[S_z] &= \mathrm{tr}(\rho S_z) = \frac{\hbar}{2}\mathrm{tr}(\rho\sigma_z) = \hbar a
\end{aligned}
$$

を得るので、これから **密度行列の行列要素** の実数 a, b, c を決められる。

問１０

a. 密度演算子 ρ **の 時間発展** は、（シュレディンガー表示で）

$$\rho(t) = \mathcal{U}(t,t_0)\rho(t_0)\mathcal{U}^\dagger(t,t_0)$$

で与えられることを証明せよ。

b. $t=0$ で **純粋アンサンブル** があったとする。時間発展がシュレーディンガー方程式に従う限り、これは **混合アンサンブル** に変わることがないことを証明せよ。

［解答］

a. 密度演算子の定義より

$$\rho(t_0) = \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$$

時刻 t_0 で $|\alpha^{(i)}\rangle$ であった各ケットは、時刻 t ではシュレディンガー方程式に従って一意的に

$$|\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t,t_0)|\alpha^{(i)}\rangle$$

に変化するので、時刻 t における密度演算子は、

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \sum_i w_i |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle\langle\alpha^{(i)}, t_0; t| \\ &= \sum_i w_i \mathcal{U}(t,t_0)|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|\mathcal{U}^\dagger(t,t_0) \\ &= \mathcal{U}(t,t_0)\rho(t_0)\mathcal{U}^\dagger(t,t_0)\end{aligned}$$

となる。

b. 時刻 t_0 で純粋アンサンブル

$$\rho(t_0) = |\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$$

があったとする。シュレディンガー方程式に従って時間発展すると

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \mathcal{U}(t,t_0)|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|\mathcal{U}^\dagger(t,t_0) \\ &= |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle\langle\alpha^{(i)}, t_0; t|\end{aligned}$$

となって、時刻 t でも純粋アンサンブルのままである。

問11　**スピン1の系** の集まりを考える。このとき **密度行列** は 3×3 行列である。この密度行列を特徴づけるのに独立な（実数の）パラメータは幾つ必要か。**アンサンブル** を完全に表すのに、**アンサンブル平均** $[S_x]$、$[S_y]$、$[S_z]$ 以外に何を知る必要があるか。

［解答］

密度行列 ρ は、トレースが 1 になるように **規格化** されたエルミート行列だから、

$$\rho = \begin{pmatrix} a & d & f \\ d^* & b & e \\ f^* & e^* & c \end{pmatrix} \qquad a+b+c=1$$

と書ける。ただし、a,b,c は実数で d,e,f は複素数である。したがって、この密度行列を特徴づけるのに必要な独立な実数のパラメータは $3+2\times 3-1=8$ 個である。アンサンブルを完全に表すには $[S_x]$、$[S_y]$、$[S_z]$ 以外に、$[S_x^2]$、$[S_y^2]$、$[S_z^2]$、$[S_xS_y]$、$[S_yS_z]$、$[S_zS_x]$ を知る必要がある。ただし、3 つの観測量 $[S_x^2]$、$[S_y^2]$、$[S_z^2]$、の間には、

$$[S_x^2]+[S_y^2]+[S_z^2]=[S_x^2+S_y^2+S_z^2]=2\hbar^2$$

という関係があるので、3 つのうち 2 つわかれば残りは自動的にきまる。また、3 つの演算子 S_xS_y、S_yS_x、S_zS_x はエルミート演算子でないので、かわりにエルミート化した演算子 $T_{xy}=\{S_x,S_y\}/2$, $T_{yz}=\{S_y,S_z\}/2$, $T_{zx}=\{S_z,S_x\}/2$ をつかうことにする。したがって、この 8 個の観測量によって密度行列が決められる。スピン z 成分の演算子 S_z の固有ケットを基底として、この 9 個の演算子を行列表示すると、つぎのようになる。

$$S_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z=\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S_x^2=\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad S_y^2=\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad S_z^2=\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$T_{xy}=\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_{yz}=\frac{\hbar^2}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \quad T_{zx}=\frac{\hbar^2}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

問１２　角運動量の固有状態 $|j, m = m_{max} = j\rangle$ が、y- 軸のまわりに無限小角 ϵ だけ、回転させられた。回転を受けた新しい状態が、元の状態に見いだされる確率を与える表式を、関数 $d^{(j)}_{m'm}$ の具体的な形を用いずに、ϵ^2 のオーダーまで求めよ。

［解答］　まず、角運動量演算子 J_y を **はしご演算子** $J_\pm$ を使って表そう。

$$
\begin{aligned}
J_y &= \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \\
J_y^2 &= \frac{-1}{4}(J_+^2 + J_-^2 - J_+J_- - J_-J_+)
\end{aligned}
$$

だから、状態 $|j, m = j\rangle$ に対する期待値は

$$
\begin{aligned}
\langle j, m = j|J_y|j, m = j\rangle &= 0 \\
\langle j, m = j|J_y^2|j, m = j\rangle &= +\frac{1}{4}\langle j, m = j|J_+J_-|j, m = j\rangle \\
&= +\frac{1}{4}\langle j, m = j|J_-^\dagger J_-|j, m = j\rangle \\
&= \frac{1}{4}(j + j)(j - j + 1)\hbar^2 \\
&= \frac{1}{2}j\hbar^2
\end{aligned}
$$

であることが分かる。

この結果を使えば、

$$
\begin{aligned}
d^{(j)}_{jj}(\epsilon) &= \langle j, m = j|\exp\left(\frac{-iJ_y\epsilon}{\hbar}\right)|j, m = j\rangle \\
&= \langle j, m = j|1 - \left(\frac{i}{\hbar}\right)J_y\epsilon + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 J_y^2\epsilon^2|j, m = j\rangle \\
&= 1 - \left(\frac{i}{\hbar}\right)\epsilon \times 0 + \frac{1}{2}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\epsilon^2 \times \frac{1}{2}j\hbar^2 \\
&= 1 - \frac{j}{4}\epsilon^2
\end{aligned}
$$

であるから、元の状態に見いだされる確率 $P(\epsilon)$ は、

$$
P(\epsilon) = |d^{(j)}_{jj}(\epsilon)|^2 = (1 - \frac{j}{4}\epsilon^2)^2 \approx 1 - \frac{j}{2}\epsilon^2
$$

となる。

問１３　j および k を行と列の添字として、**行列要素** が

$$(G_i)_{jk} = -i\hbar\epsilon_{ijk}$$

で与えられる 3×3 行列 $G_i(i=1,2,3)$ は、**角運動量の交換関係** を満足することを示せ。J_3 を対角型にする角運動量演算子 J_i の通常の 3×3 行列に、G_i を結び付ける **変換行列** の物理的（または幾何学的）意味は何か。得られた結果を **無限小回転** の下での

$$\boldsymbol{V} \to \boldsymbol{V} + \hat{\boldsymbol{n}}\,\delta\phi \times \boldsymbol{V}$$

と関係づけよ。

［解答］　完全反対称テンソル ϵ_{ijk} に関する公式

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl}$$

を使う。問題より

$$(G_i)_{\alpha\beta} = -i\hbar\epsilon_{i\alpha\beta}$$

だから、

$$\begin{aligned}
& ([G_i, G_j])_{\alpha\beta} \\
= \ & (G_i)_{\alpha\gamma}(G_j)_{\gamma\beta} - (G_j)_{\alpha\gamma}(G_i)_{\gamma\beta} \\
= \ & (-i\hbar)^2(\epsilon_{i\alpha\gamma}\epsilon_{j\gamma\beta} - \epsilon_{j\alpha\gamma}\epsilon_{i\gamma\beta}) \\
= \ & (-i\hbar)^2(\epsilon_{\gamma i\alpha}\epsilon_{\gamma\beta j} - \epsilon_{\gamma j\alpha}\epsilon_{\gamma\beta i}) \\
= \ & (-i\hbar)^2(\delta_{i\beta}\delta_{\alpha j} - \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta} - \delta_{j\beta}\delta_{\alpha i} + \delta_{ji}\delta_{\alpha\beta}) \\
= \ & (-i\hbar)^2(\delta_{i\beta}\delta_{\alpha j} - \delta_{j\beta}\delta_{\alpha i}) \\
= \ & (-i\hbar)^2\epsilon_{kij}\epsilon_{k\beta\alpha} \\
= \ & i\hbar\epsilon_{ijk}[(-i\hbar)\epsilon_{k\alpha\beta}] \\
= \ & i\hbar\epsilon_{ijk}(G_k)_{\alpha\beta}
\end{aligned}$$

となって角運動量の交換関係を満たす。

つぎに、物理的意味を考えてみよう。行列 G_3 の具体形を書くと、

$$G_3 = i\hbar\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{i\hbar}{\epsilon}(R_3(\epsilon) - 1)$$

$$
\begin{aligned}
R_3(\epsilon) &= 1 - \frac{iG_3\epsilon}{\hbar} \\
R_3(\theta) &= \exp\left(-\frac{iG_3}{\hbar}\theta\right)
\end{aligned}
$$

となって、$G_i/(i\hbar)$ は 3 次元座標空間における回転 $SO(3)$ の生成演算子となっている。$J_i/(i\hbar)$ はスピン 1 の（3 次元）スピン空間における回転 $SU(3)$の生成演算子となっている。G_i と J_i は、同じ交換関係を満たすので **ユニタリー変換**

$$U^\dagger G_i U = J_i$$

で結ばれる。ただし、

$$U \doteq \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ -i & 0 & -i \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

である。ここで、スピノル $\psi = (\psi_+, \psi_0, \psi_-)$ にたいして、

$$\begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \\ \psi_z \end{pmatrix} \equiv U \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_0 \\ \psi_- \end{pmatrix}$$

を定義すると、このスピノルは回転に対して

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \psi'_x \\ \psi'_y \\ \psi'_z \end{pmatrix} &= U \begin{pmatrix} \psi'_+ \\ \psi'_0 \\ \psi'_- \end{pmatrix} = U \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{J}\ \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\ \phi}{\hbar}\right)\begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_0 \\ \psi_- \end{pmatrix} \\
&= U \exp\left(-\frac{i\boldsymbol{J}\ \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\ \phi}{\hbar}\right) U^\dagger \begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \\ \psi_z \end{pmatrix} = R(\hat{\boldsymbol{n}}\ \phi)\begin{pmatrix} \psi_x \\ \psi_y \\ \psi_z \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となって、(ψ_x, ψ_y, ψ_z) は **ベクトル** のように変換することがわかる。（スピン 1 の粒子はベクトル粒子）

【注】 **無限小変換** の **生成演算子** の組 X_i の **交換関係**

$$[X_i, X_j] = if_{ijk}X_k \tag{1}$$

における定数 f_{ijk} を **構造定数** とよぶ。**ヤコビの恒等式**

$$[X_i, [X_j, X_k]] + [X_j, [X_k, X_i]] + [X_k, [X_i, X_j]] = 0 \tag{2}$$

に式 (1) を代入すれば、構造定数は

$$f_{jkl}f_{ilm} + f_{ijl}f_{klm} + f_{kil}f_{jlm} = 0 \tag{3}$$

をみたす。そこで、構造定数を要素にもつ行列の組 G_i

$$[G_i]_{jk} = -if_{ijk}$$

を定義すれば、式 (3) は

$$[G_i, G_j] = if_{ijk}G_k \tag{4}$$

と書ける。したがって、構造定数から作った行列の組 G_i は生成演算子の組 X_i と同じ交換関係をみたし、生成演算子のひとつの表現（**随伴表現**）になっている。問１３は、このことの角運動量演算子への応用である。文献 [15] を参照せよ。

問１４

a. $\boldsymbol{J}$ を角運動量とする。（$\boldsymbol{J}$ は軌道の $\boldsymbol{L}$ 、 **スピン** の $\boldsymbol{S}$ 、あるいは $\boldsymbol{J}$ 全体 のいずれをあらわしているとしてもよい。） J_x,J_y,J_z ($J_\pm \equiv J_x \pm iJ_y$) が通常の **角運動量の交換関係** を満足することを用いて

$$\boldsymbol{J}^{\,2} = J_z^2 + J_+J_- - \hbar J_z$$

を証明せよ

b. (a.)(あるいは他の結果) を用いて

$$J_-\psi_{j,m} = c_-\psi_{j,m-1}$$

に現れる係数 c_- に対する、「有名な」表式を導け。

［解答］

a. $J_\pm$ を J_x と J_y で書き直して計算すると

$$\begin{aligned} & J_z^2 + J_+J_- - \hbar J_z \\ &= J_z^2 + (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y) - \hbar J_z \\ &= J_z^2 + J_x^2 + J_y^2 + iJ_yJ_x - iJ_xJ_y - \hbar J_z \\ &= J_z^2 + J_x^2 + J_y^2 - i[J_x, J_y] - \hbar J_z \\ &= J_z^2 + J_x^2 + J_y^2 = \boldsymbol{J}^{\,2} \end{aligned}$$

となる。

b. 教科書 p.260 と同様にブラケットの **規格化** 条件から導ける。

$$\begin{aligned} \langle jm|J_-^\dagger J_-|jm\rangle &= \langle j,m-1|c_-^\dagger c_-|j,m-1\rangle \\ &= |c_-|^2\langle j,m-1|j,m-1\rangle = |c_-|^2 \end{aligned}$$

一方、 a. の結果を用いて

$$\begin{aligned} \langle jm|J_-^\dagger J_-|jm\rangle &= \langle jm|J_+J_-|jm\rangle = \langle jm|\boldsymbol{J}^{\,2} - J_z^2 + \hbar J_z|jm\rangle \\ &= \hbar^2\{j(j+1) - m^2 + m\} = \hbar^2(j+m)(j-m+1) \end{aligned}$$

だから、 c_- を正の実数に選んで

$$c_- = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

が導かれる。

問１５　球対称ポテンシャル $V(r)$ の中にある粒子の波動関数が

$$\psi(\boldsymbol{x}) = (x + y + 3z)f(r)$$

で与えられている。

a. ψ は $\boldsymbol{L}^2$ の固有関数であるか。そうならば l の値はいくらか。もしそうでないならば、$\boldsymbol{L}^2$ を測定したときに得られる可能な l の値をあげよ。

b. 粒子が様々な m_l の状態に見いだされる確率はいくらか。

c. $\psi(\boldsymbol{x})$ が固有値 E のエネルギー固有関数であることが分かったとする。ポテンシャル $V(r)$ をどのようにして見いだせるか述べよ。

［解答］

a. 波動関数 $\psi(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{L}^2$ の固有関数で、$l = 1$ である。じっさい、**球面調和関数** の具体形

$$\begin{aligned} Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \\ Y_1^{\pm 1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi} \end{aligned}$$

を使うと

$$\begin{aligned} \psi(\boldsymbol{x}) &= (x + y + 3z)f(r) \\ &= f(r)r(\sin\theta\cos\phi + \sin\theta\sin\phi + 3\cos\theta) \\ &= f(r)r\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(\frac{1}{2}(-Y_1^{+1} + Y_1^{-1}) + \frac{i}{2}(Y_1^{+1} + Y_1^{-1}) + \frac{3}{\sqrt{2}}Y_1^0\right) \\ &= f(r)r\sqrt{\frac{8\pi}{3}}\left(\frac{i-1}{2}Y_1^{+1} + \frac{i+1}{2}Y_1^{-1} + \frac{3}{\sqrt{2}}Y_1^0\right) \qquad (1) \end{aligned}$$

より、$\psi(\boldsymbol{x})$ は $\boldsymbol{L}^2$ の固有関数で、$l = 1$ であることがわかる。

b. 各状態 m に見いだされる確率は、球面調和関数 Y_1^m の係数の絶対値の自乗に比例するから

$$\begin{aligned} &P(m = +1) : P(m = -1) : P(m = 0) \\ &= \left|\frac{i-1}{2}\right|^2 : \left|\frac{i+1}{2}\right|^2 : \left|\frac{3}{\sqrt{2}}\right|^2 \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}:\frac{1}{2}:\frac{9}{2} = \frac{1}{11}:\frac{1}{11}:\frac{9}{11}$$

c. シュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\boldsymbol{L}^{\ 2}}{2mr^2} + V(r)\right]\psi(\boldsymbol{x}) = E\psi(\boldsymbol{x})$$

に式 (1) を代入して、動径方向のシュレディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{\hbar^2}{mr^2} + V(r)\right](rf(r)) = E(rf(r))$$

をえる。したがって、

$$V(r) = E + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{rf''(r) + 4f'(r)}{rf(r)}\right)$$

となる。

問16 **球対称ポテンシャル** 中の1粒子が、軌道角運動量 $\boldsymbol{L}^2$ と L_z の固有状態にあるとする。それぞれ固有値は $l(l+1)\hbar^2$ と $m\hbar$ である。状態 $|lm\rangle$ に関する **期待値** は

$$\langle L_x\rangle = \langle L_y\rangle = 0$$

$$\langle L_x^2\rangle = \langle L_y^2\rangle = \frac{l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2}{2}$$

であることを示せ。この結果を **半古典的** に解釈せよ。

［解答］まず、角運動量演算子 L_x,L_y をはしご演算子 L_+,L_- で表す。はしご演算子の定義から

$$\begin{aligned} L_+ &= L_x + iL_y \\ L_- &= L_x - iL_y \end{aligned}$$

だから、

$$\begin{aligned} L_x &= \frac{1}{2}(L_+ + L_-) \\ L_y &= \frac{1}{2i}(L_+ - L_-) \\ L_x^2 &= \frac{1}{4}(L_+L_+ + L_+L_- + L_-L_+ + L_-L_-) \\ L_y^2 &= \frac{-1}{4}(L_+L_+ - L_+L_- - L_-L_+ + L_-L_-) \end{aligned}$$

と書ける。したがって、

$$\begin{aligned} \langle lm|L_x|lm\rangle &= \frac{1}{2}\langle lm|L_+|lm\rangle + \frac{1}{2}\langle lm|L_-|lm\rangle = 0 \\ \langle lm|L_y|lm\rangle &= \frac{1}{2i}\langle lm|L_+|lm\rangle - \frac{1}{2i}\langle lm|L_-|lm\rangle = 0 \\ \langle lm|L_x^2|lm\rangle &= \frac{1}{4}\langle lm|L_+L_-|lm\rangle + \frac{1}{4}\langle lm|L_-L_+|lm\rangle \\ &= \frac{1}{4}(l+m)(l-m+1)\hbar^2 + \frac{1}{4}(l-m)(l+m+1)\hbar^2 \\ &= \frac{1}{2}(l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2) \\ \langle lm|L_y^2|lm\rangle &= \frac{1}{4}\langle lm|L_+L_-|lm\rangle + \frac{1}{4}\langle lm|L_-L_+|lm\rangle \\ &= \frac{1}{2}(l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2) \end{aligned}$$

半古典的に解釈すると、角運動量ベクトル $\boldsymbol{L}$ は図の円錐面上を揺らいでいると考えられる。

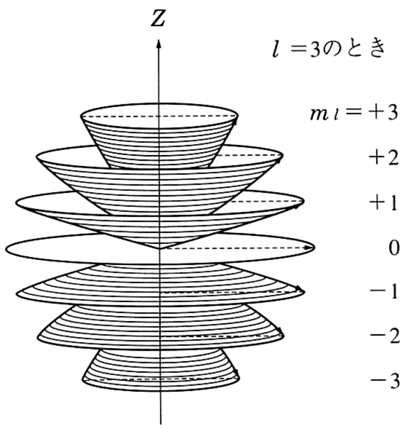


図 3.1: 軌道角運動量ベクトル

問１７　半整数の l の値、例えば $\frac{1}{2}$ が、**軌道角運動量** に許されたとする。いつものように

$$L_+ Y_{1/2}^{1/2}(\theta,\phi) = 0$$

から

$$Y_{1/2}^{1/2}(\theta,\phi) \sim e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta}$$

が推論できる。つぎに $Y_{1/2}^{-1/2}(\theta,\phi)$ を作るために、(a.)$Y_{1/2}^{1/2}(\theta,\phi)$ に L_- を作用させる、(b.)$L_- Y_{1/2}^{-1/2}(\theta,\phi) = 0$ を用いる、ことを試みよ。この二つの手続きは互いに矛盾する結果を導くことを示せ。（これは軌道角運動量に半整数値は取れないという論証を与える。）

［解答］教科書 p.274 を参照。

a.

$$\begin{aligned} Y_{1/2}^{-1/2} &\sim L_- Y_{1/2}^{+1/2} \\ &\sim (-i\hbar)e^{-i\phi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)e^{i\phi/2}\sqrt{\sin\theta} \\ &\sim e^{-i\phi/2}\frac{\cos\theta}{\sqrt{\sin\theta}} \end{aligned} \tag{1}$$

b. $L_- Y_{1/2}^{-1/2} = 0$ より

$$(-i\hbar)e^{-i\phi}\left(-i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)Y_{1/2}^{-1/2}(\theta,\phi) = 0$$

$Y_{1/2}^{-1/2}$ の ϕ 依存性は $e^{-i\phi/2}$ であることを利用すると

$$Y_{1/2}^{-1/2}(\theta,\phi) \sim e^{-i\phi/2}\sqrt{\sin\theta} \tag{2}$$

となる。

よって、(a.) と (b.) の手続きはは、互いに矛盾する結果、式 (1) と式 (2) を導く。

問１８　軌道角運動量 固有状態 $|l=2, m=0\rangle$ を考える。この状態を y-軸のまわりに角度 β だけ回転させたとする。新しい状態が $m=0,\pm1,\pm2$ に見いだされる確率を求めよ。

［解答］ 球面調和関数 の 回転行列 としての性質を使う。教科書の式 (3.6.52)

$$\mathcal{D}^{(l)}_{m0}(\alpha,\beta,\gamma=0)=\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_l^{m*}(\theta,\phi)\bigg|_{\theta=\beta,\phi=\alpha}$$

より、新しい状態が m' に見いだされる確率振幅は

$$\begin{aligned}
&\langle l=2,m=m'|\mathcal{D}(\alpha=0,\beta,\gamma=0)|l=2,m=0\rangle\\
=\;&\mathcal{D}^{(l=2)}_{m'0}(\alpha=0,\beta,\gamma=0)\\
=\;&\sqrt{\frac{4\pi}{5}}Y_2^{m'*}(\beta,0)
\end{aligned}$$

である。 球面調和関数の具体形

$$\begin{aligned}
Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)\\
Y_2^{\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}\\
Y_2^{\pm2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2i\phi}
\end{aligned}$$

を用いれば、新しい状態が、各 m に見いだされる確率として

$$\begin{aligned}
P(m=0) &= \frac{4\pi}{5}|Y_2^{0*}(\beta,0)|^2=\frac{1}{4}(3\cos^2\beta-1)^2\\
P(m=\pm1) &= \frac{4\pi}{5}|Y_2^{\pm1*}(\beta,0)|^2=\frac{3}{2}\sin^2\beta\cos^2\beta\\
P(m=\pm2) &= \frac{4\pi}{5}|Y_2^{\pm2*}(\beta,0)|^2=\frac{3}{8}\sin^4\beta
\end{aligned}$$

を得る。

問１９　**角運動量を表すシュウィンガーのモデル**で、演算子 $K_+ \equiv a_+^\dagger a_-^\dagger$ および $K_- \equiv a_+ a_-$ の物理的意味は何か。$K_\pm$ の行列要素で、ゼロでないものをあげよ。

［解答］シュウィンガーのモデルでの j と m の定義

$$j = \frac{n_+ + n_-}{2}, \quad m = \frac{n_+ - n_-}{2}$$

を思いだそう。演算子 $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ケット $|j, m\rangle$ に作用させたとき、演算子 $K_+ \equiv a_+^\dagger a_-^\dagger$ は、角運動量の z 成分 m を変えずに角運動量の大きさ j を 1 だけ増やす。演算子 $K_- \equiv a_+ a_-$ は、角運動量の z 成分 m を変えずに角運動量の大きさ j を 1 だけ減らす。

$K_\pm$ の行列要素で、ゼロでないものは、

$$\begin{aligned}
& \langle j+1, m|K_+|j, m\rangle \\
= \ & \langle n_+ = j+1+m, n_- = j+1-m|a_+^\dagger a_-^\dagger|n_+ = j+m, n_- = j-m\rangle \\
= \ & \sqrt{(j+m+1)(j-m+1)} \\
& \langle j-1, m|K_-|j, m\rangle \\
= \ & \langle n_+ = j-1+m, n_- = j-1-m|a_+ a_-|n_+ = j+m, n_- = j-m\rangle \\
= \ & \sqrt{(j+m)(j-m)}
\end{aligned}$$

である。

問２０　角運動量 $j_1 = 1$ と $j_2 = 1$ を加えて $j = 2, 1$ および 0 の状態を作る。**はしご演算子** の方法か漸化式を用いて、すべて（９個）の $\{j, m\}$ 固有ケットを $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ により表せ。答えを

$$|j = 1, m = +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|0, +\rangle, \cdots$$

のように書け。ここで + と 0 はそれぞれ $m_{1,2} = 1,\ 0$ を表している。

［解答］まず、$|j = 2, m = +2\rangle = |++\rangle$ から始めて、はしご演算子をつぎつぎと作用させて $j = 2$ の固有ケットをすべて求めよう。

$$\begin{aligned}
|j = 2, m = +2\rangle &= |++\rangle \\
|j = 2, m = +1\rangle &= \frac{1}{2\hbar} J_- |j = 2, m = +2\rangle \\
&= \frac{1}{2\hbar}(J_-^{(1)} + J_-^{(2)})|++\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0+\rangle + |+0\rangle) \\
|j = 2, m = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar} J_- |j = 2, m = +1\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar}(J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0+\rangle + |+0\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}(|-+\rangle + |+-\rangle + 2|00\rangle) \\
|j = 2, m = -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar} J_- |j = 2, m = 0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}\hbar}(J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) \frac{1}{\sqrt{6}}(|-+\rangle + |+-\rangle + 2|00\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0-\rangle + |-0\rangle) \\
|j = 2, m = -2\rangle &= \frac{1}{2\hbar} J_- |j = 2, m = -1\rangle \\
&= \frac{1}{2\hbar}(J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0-\rangle + |-0\rangle) \\
&= |--\rangle
\end{aligned}$$

つぎに、$j = 1$ の固有ケットを考えよう。$|j = 1, m = +1\rangle$ は $m = +1$

より

$$\alpha|0+\rangle + \beta|+0\rangle$$

という形に書けるはずである。

$$|j=2, m=+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0+\rangle + |+0\rangle)$$

と直交するように α, β を選べば

$$|j=1, m=+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+0\rangle - |0+\rangle)$$

を得る。これから始めてはしご演算子をつぎつぎと作用させて残りの $j=1$ の固有ケットをすべて求められる。

$$\begin{aligned}
|j=1, m=0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} J_- |j=1, m=+1\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|+0\rangle - |0+\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\
|j=1, m=-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} J_- |j=1, m=0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar}(J_-^{(1)} + J_-^{(2)}) \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0-\rangle - |-0\rangle)
\end{aligned}$$

最後に、$j=0, m=0$ の固有ケットを考えよう。$m=0$ より

$$|j=0, m=0\rangle = \alpha|+-\rangle + \beta|-+\rangle + \gamma|00\rangle$$

と書ける。$|j=1, m=0\rangle$ および $|j=2, m=0\rangle$ と直交するように α, β, γ を決めて

$$|j=0, m=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|+-\rangle + |-+\rangle - |00\rangle)$$

を得る。

問2 1

a. 任意の j （整数または半整数）に対し

$$\sum_{m=-j}^{j} |d^{(j)}_{mm'}(\beta)|^2 m$$

を計算せよ。答えを $j=1/2$ の場合に確かめよ。

b. 任意の j に対して

$$\sum_{m=-j}^{j} m^2 |d^{(j)}_{m'm}(\beta)|^2 = \frac{1}{2}j(j+1)\sin^2\beta + m'^2\frac{1}{2}(3\cos^2\beta - 1)$$

を証明せよ。

［解答］

a. 一般の j に対して

$$\begin{aligned}
\sum_{m=-j}^{j} |d^{(j)}_{mm'}|^2 m &= \sum_{m=-j}^{j} d^{(j)*}_{mm'} d^{(j)}_{mm'} m \\
&= \sum_{m=-j}^{j} \langle j,m'|\exp\left(\frac{+iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m\rangle m \langle j,m|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m'\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar}\langle j,m'|\exp\left(\frac{+iJ_y\beta}{\hbar}\right) J_z \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m'\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar}\langle j,m'|J_z\cos\beta - J_x\sin\beta|j,m'\rangle \\
&= m'\cos\beta
\end{aligned}$$

となる。ただし、演算子 $\exp(-iJ_y\beta/\hbar)$ が y 軸の回の角度 β の回転演算子であることを用いた。

$j=1/2$ の場合、教科書の式 (3.5.52) より

$$d^{(1/2)} \doteq \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix}$$

だから、

$$\sum_{m=-1/2}^{1/2} |d^{(j)}_{m,+1/2}|^2 m = \frac{1}{2}\cos^2\frac{\beta}{2} + \frac{-1}{2}\sin^2\frac{\beta}{2} = \frac{1}{2}\cos\beta$$

$$\sum_{m=-1/2}^{1/2} |d^{(j)}_{m,-1/2}|^2 m \quad = \quad \frac{1}{2}\sin^2\frac{\beta}{2} + \frac{-1}{2}\cos^2\frac{\beta}{2} = \frac{-1}{2}\cos\beta$$

となって、上式が成り立っていることが分かる。

b.

$$\begin{aligned}
\sum_{m=-j}^{j} |d^{(j)}_{m'm}|^2 m^2 &= \sum_{m=-j}^{j} |d^{(j)*}_{mm'}|^2 m^2 = \sum_{m=-j}^{j} d^{(j)*}_{mm'} d^{(j)}_{mm'} m^2 \\
&= \sum_{m=-j}^{j} \langle j,m'|\exp\left(\frac{+iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m\rangle m^2 \langle j,m|\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m'\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\langle j,m'|\exp\left(\frac{+iJ_y\beta}{\hbar}\right) J_z^2 \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)|j,m'\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\langle j,m'|\left(\exp\left(\frac{+iJ_y\beta}{\hbar}\right) J_z \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right)\right)^2 |j,m'\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\langle j,m'|(J_z\cos\beta - J_x\sin\beta)^2|j,m'\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar^2}\langle j,m'|J_z^2\cos^2\beta + J_x^2\sin^2\beta - (J_xJ_z + J_zJ_x)\sin\beta\cos\beta|j,m'\rangle \\
&= m'^2\cos^2\beta + \frac{1}{2}(j(j+1) - m'^2)\sin^2\beta \\
&= \frac{1}{2}j(j+1)\sin^2\beta + m'^2\frac{1}{2}(3\cos^2\beta - 1)
\end{aligned}$$

ただし、

$$\begin{aligned}
\langle j,m'|J_z^2|j,m'\rangle &= m'^2 \\
\langle j,m'|J_x^2|j,m'\rangle &= \frac{1}{4}\langle j,m'|(J_+^2 + J_-^2 + J_+J_- + J_-J_+)|j,m'\rangle \\
&= \frac{\hbar^2}{2}(j(j+1) - m'^2) \\
\langle j,m'|J_x|j,m'\rangle &= 0
\end{aligned}$$

などの性質を用いた。

問22

a. $j=1$ の系を考える。

$$\langle j=1,m'|J_y|j=1,m\rangle$$

を 3 × 3 行列の形に具体的に表せ。

b. $j=1$ に対してのみ、$e^{-iJ_y\beta/\hbar}$ を

$$1-i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta-\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta)$$

で置き換えることが許されることを示せ。

c. (b) を用い

$$d^{(j=1)}(\beta)=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1+\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta & 1-\cos\beta\\ \sqrt{2}\sin\beta & 2\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta\\ 1-\cos\beta & \sqrt{2}\sin\beta & 1+\cos\beta\end{pmatrix}$$

を示せ。

［解答］教科書 p.264 を参照。

a. $J_y=(J_+-J_-)/2i$ より、

$$J_y\doteq\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -\sqrt{2}i & 0\\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i\\ 0 & \sqrt{2}i & 0\end{pmatrix}$$

b. $j=1$ のときのみ

$$\left(\frac{J_y}{\hbar}-1\right)\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\left(\frac{J_y}{\hbar}+1\right)=0$$

より、

$$\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^3=\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)$$

となるので（問 4 参照）

$$\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(-i\beta)^n\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^n$$

$$
\begin{aligned}
&= 1+\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{(2m+1)!}(-i\beta)^{2m+1}\left(\frac{J_y}{\hbar}\right) \\
&\quad +\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{(2m)!}(-i\beta)^{2m}\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 \\
&= 1-i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta-\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta)
\end{aligned}
$$

c. (a.) より、

$$
J_y \doteq \frac{\hbar}{2i}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, J_y^2 \doteq \frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

だから、

$$
\begin{aligned}
d^{(j=1)}(\beta) &= 1-i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)\sin\beta-\left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2(1-\cos\beta) \\
&= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta & 1-\cos\beta \\ \sqrt{2}\sin\beta & 2\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta \\ 1-\cos\beta & \sqrt{2}\sin\beta & 1+\cos\beta \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

となる。

問２３　行列要素 $\langle\alpha_2\beta_2\gamma_2|J_3^2|\alpha_1\beta_1\gamma_1\rangle$ を $\mathcal{D}^j_{mn}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle\alpha\beta\gamma|jmn\rangle$ の級数によって表せ。

［解答］

$$
\begin{aligned}
&\langle\alpha_2\beta_2\gamma_2|J_3^2|\alpha_1\beta_1\gamma_1\rangle \\
&= \sum_{jmn}\langle\alpha_2\beta_2\gamma_2|J_3^2|jmn\rangle\langle jmn|\alpha_1\beta_1\gamma_1\rangle \\
&= \sum_{jmn} m^2\hbar^2\langle\alpha_2\beta_2\gamma_2|jmn\rangle\langle jmn|\alpha_1\beta_1\gamma_1\rangle \\
&= \sum_{jmn} m^2\hbar^2\mathcal{D}^j_{mn}(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)\mathcal{D}^{j*}_{mn}(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1)
\end{aligned}
$$

問２４　**スピン** 1/2 の 2 粒子からなる系を考える。**観測者** A はもっぱら一方の粒子の **スピン成分** (S_x, S_y など) を測定し、観測者 B はもっぱら他方の粒子のスピン成分を測定する。この系は **スピン一重項** 、（すなわち $S_{全体} = 0$）の状態にあることが分かっていたとする。
a. 観測者 B が何も観測しないとき、観測者 A が $S_{1z} = \hbar/2$ を得る確率はいくらか。同じ問題を $S_{1x} = \hbar/2$ の場合に考えよ。

b. 観測者 B が粒子 2 のスピンを $S_{2z} = \hbar/2$ であると確定した。(i) A が S_{1z} を測定するとき、(ii) A が S_{1x} を測定するとき、観測者 A の測定結果について何が結論できるか。得られた答えが正しいことを説明せよ。

［解答］
a. 教科書の式 (3.9.1) と (3.9.4) より、スピン一重項のケット $|\alpha\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_{1z}+;S_{2z}-\rangle - |S_{1z}-;S_{2z}+\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_{1x}-;S_{2x}+\rangle - |S_{1x}+;S_{2x}-\rangle)
\end{aligned}
$$

と書ける。

したがって、観測者 A が $S_{1z} = +\hbar/2$ および $S_{1x} = +\hbar/2$ を得る確率は

$$
\begin{aligned}
P(S_{1z} = +\hbar/2) &= |\langle S_{1z}+;S_{2z}+|\alpha\rangle|^2 + |\langle S_{1z}+;S_{2z}-|\alpha\rangle|^2 = \frac{1}{2} \\
P(S_{1x} = +\hbar/2) &= |\langle S_{1x}+;S_{2x}+|\alpha\rangle|^2 + |\langle S_{1x}+;S_{2x}-|\alpha\rangle|^2 = \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

となる。

b. B が $S_{2z} = +\hbar/2$ を観測したあとの系の状態 $|\alpha\rangle$ は

$$
\begin{aligned}
|\alpha\rangle &= -|S_{1z}-;S_{2z}+\rangle \\
&= \frac{-1}{\sqrt{2}}(|S_{1x}+;S_{2z}+\rangle - |S_{1x}-;S_{2z}+\rangle)
\end{aligned}
$$

と書ける。したがって、観測者 A が S_{1z} を観測した場合 $S_{1z} = \pm\hbar/2$ を得る確率は

$$
\begin{aligned}
P(S_{1z} = +\hbar/2) &= |\langle S_{1z}+;S_{2z}+|\alpha\rangle|^2 + |\langle S_{1z}+;S_{2z}-|\alpha\rangle|^2 = 0 \\
P(S_{1z} = -\hbar/2) &= |\langle S_{1z}-;S_{2z}+|\alpha\rangle|^2 + |\langle S_{1z}-;S_{2z}-|\alpha\rangle|^2 = 1
\end{aligned}
$$

となり、常に $(-\hbar/2)$ を観測する。

また、観測者Aが S_{1x} を観測した場合 $S_{1x}=\pm\hbar/2$ を得る確率は

$$\begin{aligned}P(S_{1x}=+\hbar/2) &= |\langle S_{1x}+;S_{2z}+|\alpha\rangle|^2+|\langle S_{1x}+;S_{2z}-|\alpha\rangle|^2=\frac{1}{2}\\ P(S_{1x}=-\hbar/2) &= |\langle S_{1x}-;S_{2z}+|\alpha\rangle|^2+|\langle S_{1x}-;S_{2z}-|\alpha\rangle|^2=\frac{1}{2}\end{aligned}$$

となり、$+\hbar/2$ と $-\hbar/2$ をランダムに観測する。

【量子暗号学入門】

絶対に盗聴されない暗号を作るためにスパイたちは日夜知恵を絞ってきたが、ついに、物理学者は隠れて盗聴される心配のない暗号を量子力学の基本法則の助けを借りて実現することに成功した。[24, 23]

暗号装置は、2個の電子を1個は y(+) 方向に他方は y(−) 方向に放射する放射線源で、全角運動量がゼロの状態（一重項状態）

$$|\text{一重項}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|S_z;+\rangle_a|S_z;-\rangle_b-|S_z;-\rangle_a|S_z;+\rangle_b)$$

で電子対を放出する。y軸の両端には恋人たち Alice と Bob がそれぞれいて電子のスピンを観測する。ケット $|\rangle_a$ は y(+) 方向の端にいる Alice によって観測される電子の状態を表す。ケット $|\rangle_b$ は y(−) 方向の端にいる Bob によって観測される電子の状態を表す。

Alice と Bob は、それぞれ単位ベクトル $\boldsymbol{a}_i,\boldsymbol{b}_j,(i,j=1,2,3)$ 方向のスピン成分を測定する3台の装置を持っている。ベクトル $\boldsymbol{a}_i,\boldsymbol{b}_j$ は、x-z 平面上にあり z 軸と θ_i^a,θ_j^b の角をなす。上付きの添え字 a と b は、それぞれ Alice と Bob の測定装置であることを表す。二人は、それぞれ独立にかつランダムに自分の測定装置を選んで測定を繰り返す。

さて、ここで二人の仲を邪魔しようとしている Eve が登場する。Eve は Alice の方へ飛んで行く粒子のスピンの情報を得ようとして途中でスピンを測定しようとする。しかし、量子力学の原理によりスピンの状態ケットを乱すことなく測定することはできない。Alice と Bob は、測定結果の統計を分析してベルの不等式が破られているかどうかを調べることにより、状態ケットが乱されたかどうか知ることが出来る。この原理を利用すれば Alice と Bob は Eve に秘密に通信することができるのである。

問25 階数1の **球面テンソル** (すなわちベクトル)

$$V_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}}, \quad V_0^{(1)} = V_z$$

を考える。問題22で与えた **回転行列** $d^{(1)}$ の表式を用いて

$$\sum_{q'} d_{qq'}^{(1)}(\beta) V_{q'}^{(1)} \tag{1}$$

を計算せよ。その答えは、y- 軸のまわりで回転したときの $V_{x,\ y,\ z}$ の変換の性質から期待されるものと一致することを示せ。

[解答] 式 (1) より、

$$\begin{pmatrix} V_{+1}^{\prime(1)} \\ V_0^{\prime(1)} \\ V_{-1}^{\prime(1)} \end{pmatrix} = \sum_{q'} d_{qq'}^{(1)}(\beta) V_{q'}^{(1)}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta & 1-\cos\beta \\ \sqrt{2}\sin\beta & 2\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta \\ 1-\cos\beta & \sqrt{2}\sin\beta & 1+\cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{+1}^{(1)} \\ V_0^{(1)} \\ V_{-1}^{(1)} \end{pmatrix}$$

を得る。一方、y- 軸のまわりを β だけ回転したときの $V_{x,\ y,\ z}$ の変換の性質

$$\begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} V'_x \\ V'_y \\ V'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_x\cos\beta + V_z\sin\beta \\ V_y \\ V_z\cos\beta - V_x\sin\beta \end{pmatrix}$$

からも、おなじ結果

$$\begin{pmatrix} V_{+1}^{\prime(1)} \\ V_0^{\prime(1)} \\ V_{-1}^{\prime(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(V'_x + iV'_y)/\sqrt{2} \\ V'_z \\ (V'_x - iV'_y)/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(V_x\cos\beta + V_z\sin\beta + iV_y)/\sqrt{2} \\ V_z\cos\beta - V_x\sin\beta \\ (V_x\cos\beta + V_z\sin\beta - iV_y)/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta & 1-\cos\beta \\ \sqrt{2}\sin\beta & 2\cos\beta & -\sqrt{2}\sin\beta \\ 1-\cos\beta & \sqrt{2}\sin\beta & 1+\cos\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{+1}^{(1)} \\ V_0^{(1)} \\ V_{-1}^{(1)} \end{pmatrix}$$

が得られる。

問2 6

a. 2個の異なる **ベクトル** $\boldsymbol{U} = (U_x, U_y, U_z)$ と $\boldsymbol{V} = (V_x, V_y, V_z)$ から、階数1の **球面テンソル** を作れ。$U_{x,y,z}$ および $V_{x,y,z}$ を用い、具体的に $T^{(1)}_{\pm1,0}$ を表せ。

b. 2個の異なるベクトル $\boldsymbol{U}$ と $\boldsymbol{V}$ から、階数2の球面テンソルを作れ。$U_{x,y,z}$ および $V_{x,y,z}$ を用い、具体的に $T^{(2)}_{\pm2,\pm1,0}$ を表せ。

［解答］

a. 階数1 ($j = 1$) の二つの球面テンソル

$$
\begin{aligned}
U_{\pm1} &= \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(U_x \pm iU_y) \quad U_0 = U_z \\
V_{\pm1} &= \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(V_x \pm iV_y) \quad V_0 = V_z
\end{aligned}
$$

を合成して階数1の球面テンソルを作ればよいので、問2 0で得た **クレプシュ・ゴルダン係数** を利用できる。教科書の式 (3.10.27) を参照せよ。したがって、

$$
\begin{aligned}
T^{(1)}_{+1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_{+1}V_0 - U_0V_{+1}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{-\frac{1}{\sqrt{2}}(U_xV_z - U_zV_x) - \frac{i}{\sqrt{2}}(U_yV_z - U_zV_y)\right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}i}\frac{-1}{\sqrt{2}}\{(\boldsymbol{U} \times \boldsymbol{V})_x + i(\boldsymbol{U} \times \boldsymbol{V})_y\} \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U} \times \boldsymbol{V})_{+1}
\end{aligned}
$$

同様にして、

$$
\begin{aligned}
T^{(1)}_{0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_{+1}V_{-1} - U_{-1}V_{+1}) \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U} \times \boldsymbol{V})_0 \\
T^{(1)}_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_0V_{-1} - U_{-1}V_0) \\
&= \frac{i}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{U} \times \boldsymbol{V})_{-1}
\end{aligned}
$$

を得る。

b. これも、問２０の結果を用いて、

$$
\begin{aligned}
T^{(2)}_{+2} &= U_{+1}V_{+1} \\
&= \frac{1}{2}(U_x + iU_y)(V_x + iV_y) \\
T^{(2)}_{-2} &= U_{-1}V_{-1} \\
&= \frac{1}{2}(U_x - iU_y)(V_x - iV_y) \\
T^{(2)}_{+1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_{+1}V_0 + U_0V_{+1}) \\
&= -\frac{1}{2}\left\{(U_xV_z + U_zV_x) + i(U_yV_z + U_zV_y)\right\} \\
T^{(2)}_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(U_0V_{-1} + U_{-1}V_0) \\
&= \frac{1}{2}\left\{(U_xV_z + U_zV_x) - i(U_yV_z + U_zV_y)\right\} \\
T^{(2)}_{0} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(U_{+1}V_{-1} + 2U_0V_0 + U_{-1}V_{+1}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}(-U_xV_x - U_yV_y + 2U_zV_z)
\end{aligned}
$$

を得る。

問２７　中心力ポテンシャルによってある定まった中心に **束縛** された、スピンを持たない粒子を考える。
a. 行列要素 $\langle n',l',m'|\mp(x\pm iy)/\sqrt{2}|n,l,m\rangle$ と $\langle n',l',m'|z|n,l,m\rangle$ を **ウィグナー・エッカルトの定理** のみを用いて、できるだけ関係づけよ。どのような条件のとき行列要素がゼロにならないかを確かめよ。

b. 同じ問題を、波動関数 $\phi(\boldsymbol{x}\ ) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ を用いて検討せよ。

［解答］

a. 問題の行列要素は、階数 1 の **球面テンソル** $T_{\pm1}^{(1)} = \mp(x\pm iy)/\sqrt{2}$、$T_0^{(1)} = z$ の行列要素であるから、ウィグナー・エッカルトの定理

$$\langle n'l'm'|T_q^{(1)}|nlm\rangle = \langle l1;mq|l1,l'm'\rangle\frac{\langle n'l'||T^{(1)}||nl\rangle}{\sqrt{2l+1}}$$

より、

$$\frac{\langle n'l'm'|T_{\pm1}^{(1)}|nlm\rangle}{\langle l1;m,\pm1|l1,l'm'\rangle} = \frac{\langle n'l'm'|T_0^{(1)}|nlm\rangle}{\langle l1;m,0|l1,l'm'\rangle}$$

という関係がある。行列要素が 0 にならない必要条件は **クレプシュ・ゴルダン係数** が 0 にならないことであり、

$$\begin{aligned} m' &= m+q \\ l' &= |l-1|,l,l+1 \quad (\text{ただし、}l=0\text{ かつ }l'=0\text{ を除く}) \end{aligned}$$

となる。

さらに、空間反転演算子 π に対する変換性

$$\begin{aligned} \pi|nlm\rangle &= (-1)^l|nlm\rangle \\ \pi T_q^{(1)}\pi &= -T_q^{(1)} \end{aligned}$$

を考慮すると、$l \neq l'$ のときのみ行列要素がゼロでない。したがって、結局

$$\begin{aligned} m' &= m+q \\ l' &= |l-1|,l+1 \end{aligned}$$

となる。

b.

$$
\begin{aligned}
&\langle n', l', m'| \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm iy)|n, l, m\rangle \\
&= \int r^2 dr \int d\Omega R^*_{n'l'}(r) Y^{m'*}_{l'}(\theta, \phi)\sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y^{\pm 1}_1 R_{nl}(r) Y^m_l(\theta, \phi) \\
&= A(n', l', n, l) \times \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int d\Omega Y^{m'*}_{l'} Y^m_l Y^{\pm 1}_1 \\
&= A(n', l', n, l)\sqrt{\frac{(2l+1)}{(2l'+1)}} \\
&\quad \times \langle l, 1; 00|l, 1; l'0\rangle \langle l, 1; m, \pm 1|l, 1; l', m'\rangle
\end{aligned}
$$

同様にして

$$
\begin{aligned}
&\langle n', l', m'|z|n, l, m\rangle \\
&= \int r^2 dr \int d\Omega R^*_{n'l'}(r) Y^{m'*}_{l'}(\theta, \phi)\sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y^0_1 R_{nl}(r) Y^m_l(\theta, \phi) \\
&= A(n', l', n, l) \times \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int d\Omega Y^{m'*}_{l'} Y^m_l Y^0_1 \\
&= A(n', l', n, l)\sqrt{\frac{(2l+1)}{(2l'+1)}} \\
&\quad \times \langle l, 1; 00|l, 1; l'0\rangle \langle l, 1; m, 0|l, 1; l', m'\rangle
\end{aligned}
$$

を得る。ただし、動径積分を

$$A(n', l', n, l) = \int r^3 dr R^*_{n'l'}(r) R_{nl}(r)$$

とおいて、3 つの **球面調和関数** の積の積分の式 (3.7.73)

$$
\begin{aligned}
&\int d\Omega Y^{m*}_l Y^{m1}_{l1} Y^{m2}_{l2} \\
&= \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1 l_2; 00|l_1 l_2; l0\rangle \langle l_1 l_2; m_1 m_2|l_1 l_2; lm\rangle
\end{aligned}
$$

をもちいた。

以上のことから

$$\frac{\langle n'l'm'| \mp (x \pm iy)/\sqrt{2}|nlm\rangle}{\langle l, 1; m, \pm 1|l, 1; l', m'\rangle} = \frac{\langle n'l'm'|z|nlm\rangle}{\langle l, 1; m, 0|l, 1; l', m'\rangle}$$

という関係がある。行列要素が 0 にならない条件は、上式の **クレプシュ・ゴルダン係数** が 0 にならない条件であり、

$$
\begin{aligned}
m' &= m + q \\
l' &= |l-1|, l, l+1 \qquad \text{（ただし、l=0 かつ l'=0 を除く）}
\end{aligned}
$$

となる。

さらに、空間反転演算子 π に対する変換性

$$
\begin{aligned}
\pi|nlm\rangle &= (-1)^l|nlm\rangle \\
\pi T_q^{(1)}\pi &= -T_q^{(1)}
\end{aligned}
$$

を考慮すると、$l \neq l'$ のときのみ行列要素がゼロでない。したがって、結局

$$
\begin{aligned}
m' &= m + q \\
l' &= |l-1|, l+1
\end{aligned}
$$

となる。

問２８

a. 階数２の **球面（既約）テンソル** の成分として、xy ,xz ,(x^2-y^2) を表せ。

b. 期待値

$$Q \equiv e\langle \alpha, j, m=j|(3z^2-r^2)|\alpha, j, m=j\rangle$$

は、4重極モーメント と呼ばれる。Q と適当な **クレプシュ・ゴルダン係数** を用いて

$$e\langle \alpha, j, m'|(x^2-y^2)|\alpha, j, m=j\rangle$$

（ここで $m'=j, j-1, j-2, \cdots$）を計算せよ。

［解答］

a. ベクトル $r_{+1}=-(x+iy)/\sqrt{2}$,$r_0=z$, $r_{-1}=(x-iy)/\sqrt{2}$ をもちいて、問２６の結果を利用して２階のテンソルをつくると、

$$\begin{aligned} T^{(2)}_{\pm 2} &= \frac{1}{2}(x^2 \pm 2ixy - y^2) \\ T^{(2)}_{\pm 1} &= \mp(x \pm iy)z \\ T^{(2)}_{0} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(3z^2-r^2) \end{aligned}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} xy &= \frac{1}{2i}(T^{(2)}_{+2} - T^{(2)}_{-2}) \\ xz &= \frac{1}{2}(-T^{(2)}_{+1} + T^{(2)}_{-1}) \\ x^2-y^2 &= T^{(2)}_{+2} + T^{(2)}_{-2} \end{aligned}$$

を得る。

b. ４重極モーメント Q は、a. でもとめた２階のテンソルをつかって

$$Q = e\sqrt{6}\langle \alpha, j, m=j|T^{(2)}_0|\alpha, j, m=j\rangle$$

とかける。また、もとめる行列要素は

$$\begin{aligned} e\langle \alpha, j, m'|(x^2-y^2)|\alpha, j, m=j\rangle &= e\langle \alpha, j, m'|T^{(2)}_{+2} + T^{(2)}_{-2}|\alpha, j, m=j\rangle \\ &= e\langle \alpha, j, j-2|T^{(2)}_{-2}|\alpha, j, m=j\rangle \delta_{m', j-2} \end{aligned}$$

とかける。ただし、**m選択則** より $m' \neq m \pm 2$ の項は 0 となることと条件 $|m'| \leq j$ をもちいた。ここで、**ウィグナー・エッカルトの定理** より、

$$
\begin{aligned}
& e\langle \alpha, j, j-2 | T^{(2)}_{-2} | \alpha, j, m=j \rangle \\
= & \frac{Q\langle j2; j, -2 | j2; j, j-2 \rangle}{\sqrt{6}\langle j2; j, 0 | j2; j, j \rangle} \\
= & \frac{Q}{\sqrt{j(2j-1)}}
\end{aligned}
$$

となる。最後の式変形では、**クレプシュ・ゴルダン係数の漸化式** (3.7.49)

$$
\begin{aligned}
& \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1 \rangle \\
= & \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)}\langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; j, m \rangle \\
& + \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)}\langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; j, m \rangle
\end{aligned}
$$

を二度もちいてえられる関係

$$
\sqrt{j(2j-1)}\langle j2; j, -2 | j2; j, j-2 \rangle = \sqrt{6}\langle j2; j, 0 | j2; j, j \rangle
$$

をもちいた。

問２９　原点に置かれた **スピン** $3/2$ の **原子核** が、外部から不均一な電場を受けている。基礎になる **電気４重極相互作用** は

$$H_{int} = \frac{eQ}{2S(S-1)\hbar^2}\left[\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0 S_x^2 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)_0 S_y^2 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)_0 S_z^2\right]$$

のようにとることができる。ここで ϕ はラプラス方程式を満たす静電ポテンシャルであり、座標軸は

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y\partial z}\right)_0 = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z\partial x}\right)_0 = 0$$

となるように選ばれている。このとき相互作用エネルギーは

$$A(3S_z^2 - \boldsymbol{S}^{\,2}) + B(S_+^2 + S_-^2)$$

のように書くことができることを示し、A と B を $(\partial^2\phi/\partial x^2)_0$ などで表せ。エネルギー固有ケットを（$|m\rangle$, $m = \pm 3/2, \pm 1/2$ を用いて）定め、対応するエネルギー固有値を求めよ。縮退はあるか。

［解答］まず、A, B をもとめよう。スピン演算子 S_x, S_y は

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{1}{2}(S_+ + S_-) \\ S_y &= \frac{1}{2i}(S_+ - S_-) \end{aligned}$$

とはしご演算子であらわせるので

$$S_x^2 - S_y^2 = \frac{1}{2}(S_+^2 + S_-^2)$$

と書けることと、**ポアッソンの方程式**

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)_0 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)_0 = 0$$

を用いると、

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_0 S_x^2 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)_0 S_y^2 + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)_0 S_z^2 \\ = \ &\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)(S_x^2 + S_y^2) + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)(S_x^2 - S_y^2) + \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right) S_z^2 \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)(3S_z^2 - \boldsymbol{S}^{\,2}) + \frac{1}{4}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)(S_+^2 + S_-^2)$$

をえる。よって、

$$A = \frac{eQ}{4S(S-1)\hbar^2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial z^2}\right)$$
$$B = \frac{eQ}{8S(S-1)\hbar^2}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right)$$

と書ける。

ハミルトニアン H_{int} を $|m\rangle$,$m = \pm 3/2, \pm 1/2$ を基底ケットにとって行列表示すると

$$\begin{bmatrix} 3A & 0 & 2\sqrt{3}B & 0 \\ 0 & -3A & 0 & 2\sqrt{3}B \\ 2\sqrt{3}B & 0 & -3A & 0 \\ 0 & 2\sqrt{3}B & 0 & 3A \end{bmatrix}$$

となる。固有方程式は

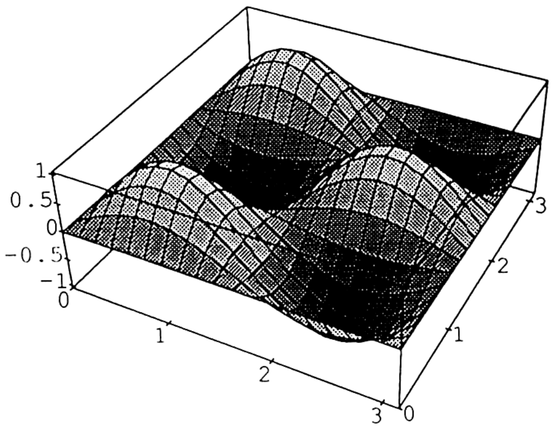
$$\left[9A^2 + 12B^2 - E^2\right]^2 = 0$$

となって、エネルギー固有値は 2 重に縮退している。この縮退は、ハミルトニアンの **時間反転不変性** の結果角運動量 j が半整数の系に必ず存在する **クラマースの縮退** の例となっている。（教科書 4．4 節参照）

時間反転をすれば、**スピン** の向きは逆になるがハミルトニアンは不変である。したがって、スピン逆向きの状態は元の状態と同じエネルギーを持つ固有状態となる。また、j が半整数のときは、$|j = 1, m = 0\rangle$ のように $\langle \boldsymbol{S} \rangle$ がゼロに成る状態を作れないので、スピン逆向きの状態は元の状態とは異なる状態となる。よって、クラマースの縮退が起こる。このことを本問の固有ケットについて確かめよ。

第 4 章

量子力学における対称性



問1　次の系に対してエネルギー準位と **縮退度** を 下から3番目まで 計算せよ。
a. 一辺 L の箱中の相互作用していない3個のスピン $\frac{1}{2}$ の粒子。
b. 一辺 L の箱中の相互作用していない4個のスピン $\frac{1}{2}$ の粒子。

［解答］

まず、一粒子の固有エネルギーは、

$$\epsilon(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$
$$n_x, n_y, n_z \text{は正の整数}$$

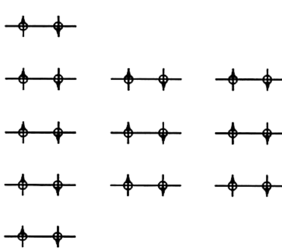
である。粒子のスピンは $\frac{1}{2}$ だから、各軌道状態に対してスピン上向き、スピン下向きの2つのスピン状態があることを考慮すれば、一粒子状態の縮退度は下図のようになる。

【a】 スピン $\frac{1}{2}$ の粒子は **フェルミ粒子** であるから、一つの一粒子状態を2つ以上の粒子が占めることはできない。

3粒子系の **基底状態** を作るには、2粒子が $E = 3E_u$ の2重に縮退した一粒子状態をしめ、3番目の粒子が $E = 6E_u$ の6重に縮退した一粒子状態のうちの1つをしめればよい。よって、3粒子系の基底状態の縮退度 g_0 と全エネルギー E_0 は

$$g_0 = {}_2C_2 \times {}_6C_1 = 6 \quad E_0 = (3+3+6)E_u = 12E_u$$

となる。



$(n_x, n_y, n_z) = (2,2,2)$　$E = 12E_u$ 6重縮退
$(n_x, n_y, n_z) = (1,1,3)$　$E = 11E_u$ 6重縮退
$(n_x, n_y, n_z) = (1,2,2)$　$E = 9E_u$ 6重縮退
$(n_x, n_y, n_z) = (1,1,2)$　$E = 6E_u$ 6重縮退
$(n_x, n_y, n_z) = (1,1,1)$　$E = 3E_u$ 2重縮退

図 4.1: 一粒子のエネルギー固有状態

第一励起状態をつくるには、2つの方法がある。ひとつは、2粒子が $E = 3E_u$ の2重に縮退した一粒子状態をしめ3番目の粒子が $E = 9E_u$ の6重に縮退した一粒子状態のうちの1つをしめる場合。もう一つは、1粒子が $E = 3E_u$ の2重に縮退した一粒子状態をしめ残りの2粒子が $E = 6E_u$ の6重に縮退した一粒子状態のうちの2つをしめる場合。よって、3粒子系の第一励起状態の縮退度 g_1 と全エネルギー E_1 は

$$g_1 = {}_2C_2 \times {}_6C_1 + {}_2C_1 \times {}_6C_2 = 36 \quad E_1 = 15E_u$$

となる。

第二励起状態をつくるには、2粒子が $E = 3E_u$ の2重に縮退した一粒子状態をしめ、3番目の粒子が $E = 11E_u$ の6重に縮退した一粒子状態のうちの1つをしめればよい。よって、3粒子系の第二励起状態の縮退度 g_2 と全エネルギー E_2 は

$$g_2 = {}_2C_2 \times {}_6C_1 = 6 \quad E_2 = 17E_u$$

となる。

【b】 同様にして、4粒子系の場合に

$$\begin{aligned}
g_0 &= {}_2C_2 \times {}_6C_2 = 15 \\
E_0 &= (3+3+6+6)E_u = 18E_u \\
g_1 &= {}_2C_2 \times {}_6C_1 \times {}_6C_1 + {}_2C_1 \times {}_6C_3 = 76 \\
E_1 &= (3+3+6+9)E_u = (3+6+6+6)E_u = 21E_u \\
g_2 &= {}_2C_2 \times {}_6C_1 \times {}_6C_1 = 36 \\
E_2 &= (3+3+6+11)E_u = 23E_u
\end{aligned}$$

を得る。

問2 $\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}$ は **平行移動演算子** (変位ベクトル $\boldsymbol{d}$) を、$\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\phi)$ は **回転演算子** ($\hat{\boldsymbol{n}},\phi$ はそれぞれ回転軸と回転角) を、π は **パリティ演算子** を表すとする。次の組合せの中で、交換するものがあればどれか、その理由は？

a. $\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}$ と $\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}'}$ ($\boldsymbol{d}$ と $\boldsymbol{d}'$ は方向が異なる)。

b. $\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\phi)$ と $\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}}',\phi')$ ($\hat{\boldsymbol{n}}$ と $\hat{\boldsymbol{n}}'$ は方向が異なる)。

c. $\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}$ と π。

d. $\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\phi)$ と π。

［解答］

a. 平行移動の **生成演算子** (運動量演算子) p_i は、**交換関係** $[p_i,p_j]=0$ を満たすアーベル型なので、有限の変位 $\boldsymbol{d}$ を行う平行移動演算子も

$$\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{d}}{\hbar}\right),\quad \mathcal{T}_{\boldsymbol{d}'}=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{d}'}{\hbar}\right)$$

$$\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}'}=\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}'}\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{d}+\boldsymbol{d}')}{\hbar}\right)$$

となって交換する。

b. 回転の生成演算子 (**角運動量演算子**) J_i は **交換関係** $[J_i,J_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$ を満たす非アーベル型なので、異なった方向の有限の回転を行う回転演算子も

$$\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\phi)=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\,\phi}{\hbar}\right)$$

$$\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}}',\phi')=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}'\phi'}{\hbar}\right)$$

$$\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\phi)\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}}',\phi')\neq\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}}',\phi')\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}},\phi)$$

となって交換しない。

c. 平行移動の生成演算子 (運動量演算子) p_i は、パリティが奇の **極性ベクトル** だから $\pi^{-1}\boldsymbol{p}\,\pi=-\boldsymbol{p}$ となり **交換関係** を満たさない ($[\boldsymbol{p},\pi]\neq 0$)。したがって、有限の変位 $\boldsymbol{d}$ を行う平行移動演算子

$$\mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{d}}{\hbar}\right)$$

に対しても

$$\pi^{-1}\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\ \cdot \boldsymbol{d}}{\hbar}\right)\pi \ = \ \exp\left(\frac{-i\pi^{-1}\boldsymbol{p}\ \pi\cdot \boldsymbol{d}}{\hbar}\right)=\exp\left(\frac{+i\boldsymbol{p}\ \cdot \boldsymbol{d}}{\hbar}\right)$$

となり、平行移動と空間反転は交換しない（$[\pi, \mathcal{T}_{\boldsymbol{d}}\ ] \neq 0$）。

d. 回転の生成演算子（角運動量演算子）J_i は、パリティが偶の **軸性ベクトル** だから $\pi^{-1}\boldsymbol{J}\ \pi = +\boldsymbol{J}$ (4.2.16) となり交換関係を満たす ($[\boldsymbol{J}\ ,\pi] = 0$)。したがって、有限の回転を行う回転演算子

$$\mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}}\ ,\phi)=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}\ \cdot\hat{\boldsymbol{n}}\ \phi}{\hbar}\right)$$

に対しても

$$\pi^{-1}\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}\ \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\ \phi}{\hbar}\right)\pi \ = \ \exp\left(\frac{-i\pi^{-1}\boldsymbol{J}\ \pi\cdot \hat{\boldsymbol{n}}\ \phi}{\hbar}\right)=\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{J}\ \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\ \phi}{\hbar}\right)$$

となり、回転と空間反転は交換する（$[\pi, \mathcal{D}(\hat{\boldsymbol{n}}\ ,\phi)] = 0$）。

> 問 3　ある量子力学的状態 Φ が、**反交換** する二つの **エルミート演算子** A, B
>
> $$AB + BA = 0$$
>
> の同時固有状態であると分かっている。状態 Φ における A と B の固有値に関して何がいえるか。**パリティ演算子**（$\pi = \pi^{-1} = \pi^{\dagger}$ を満足するように選べる）と **運動量演算子** を用いて、その論点を説明せよ。

［解答］状態 Φ が同時固有状態であるから、演算子 A, B の固有値を α, β とすると、反交換関係 $AB + BA = 0$ より

$$(AB + BA)\Phi = (\alpha\beta + \beta\alpha)\Phi = 2\alpha\beta\Phi = 0$$

よって $\alpha = 0$ または $\beta = 0$ となる。第 1 章の問 1 6 参照。

パリティ演算子 π と運動量演算子 $\boldsymbol{p}$ の場合、式 (4.2.10) より $\boldsymbol{p}\ \pi + \pi\boldsymbol{p} = 0$ で反交換関係をみたし、π の固有値は ±1 であるから、$\boldsymbol{p}$ の固有値 $\boldsymbol{p}\,'$ は 0 でなければならない。よって、π と $\boldsymbol{p}$ との同時固有ケットは $\boldsymbol{p}\,' = 0$ の場合に限られる。

問 4 **スピン** $1/2$ **の粒子** が **球対称ポテンシャル** によって、ある固定された中心に **束縛** されている。
a. スピン角関数 $\mathcal{Y}_{l=0}^{j=1/2,m=1/2}$ を書き表せ。
b. $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{x})\mathcal{Y}_{l=0}^{j=1/2,m=1/2}$ を他の $\mathcal{Y}_{l}^{j,m}$ を用いて表せ。
c. (b.) で得られた結果は、演算子 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x}$ が回転および空間反転（パリティ）のもとで持つ変換の性質を見ると理解できることを示せ。

［解答］
a. 教科書上巻 294 頁の式 (3.7.64) より

$$\mathcal{Y}_{l=0}^{j=+1/2,m=+1/2}=\begin{pmatrix} Y_0^0(\theta,\phi) \\ 0 \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

b.

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{x})\mathcal{Y}_{l=0}^{j=1/2,m=1/2} &= \begin{pmatrix} z & x-iy \\ x+iy & -z \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Y_0^0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} zY_0^0 \\ (x+iy)Y_0^0 \end{pmatrix}=\frac{r}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix} Y_1^0 \\ -\sqrt{2}Y_1^1 \end{pmatrix} \\ &= -r\mathcal{Y}_{l=1}^{j=1/2,m=1/2}\end{aligned}$$

c. 演算子 $(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x})$ は、**擬スカラー演算子** である。これは、回転に対してスカラーのように変換するので、**ウィグナー・エッカルトの定理** より量子数 j,m を変化させない。また、空間反転に対しては符号を変えるので、異なったパリティの（l が奇数だけ異なる）状態を結び付ける。

(b) の結果は、まさしくこの性質を満たしている。

問 5　**弱い（中性カレントの）相互作用** のために、原子内電子と **原子核** の間には次のような **パリティ非保存のポテンシャル** が存在する：

$$V = \lambda[\delta^{(3)}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{p} + \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{p}\,\delta^{(3)}(\boldsymbol{x})]$$

ここで $\boldsymbol{S}$ と $\boldsymbol{p}$ は電子のスピン演算子と運動量演算子であり、核の位置は原点にとる。その結果、ふつう $|n,l,j,m\rangle$ で特徴づけられる **アルカリ原子の基底状態** には、他の固有状態からの次のような非常にわずかな寄与が、実際含まれている：

$$\begin{aligned}|n,l,j,m\rangle \;\to\; & |n,l,j,m\rangle \\ & + \sum_{n',l',j',m'} C_{n'l'j'm'}|n',l',j',m'\rangle\end{aligned}$$

ゼロでない寄与を与える (n',l',j',m') に関して、 **対称性** <u>のみ</u> を考慮して何がいえるか。動径波動関数とエネルギー準位はすべて分かっていると仮定せよ。$C_{n'l'j'm'}$ をどのように計算したらよいか示せ。(n',l',j',m') に対する制限は他にあるか。

第 5 章の式 (5.1.44) より

$$C_{n'l'j'm'} = \frac{\langle n'l'j'm'|V|nljm\rangle}{E_{nljm} - E_{n'l'j'm'}}$$

となるので、行列要素 $\langle n'l'j'm'|V|nljm\rangle$ がゼロでない条件を考える。
回転対称性
V は、擬 <u>スカラー</u> 演算子 $T_0^{(0)}$ だから、 **ウィグナー・エッカールトの定理** より

$$\langle n'l'j'm'|V|nljm\rangle = \delta_{jj'}\delta_{mm'}\frac{\langle n'l'j'||S||nlj\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

（教科書上巻 p.329、例 1）となる。よって $j=j', m=m'$ の場合のみゼロでない。
空間反転対称性
V は、<u>擬</u> スカラー演算子 $T_0^{(0)}$ だから、 **パリティ選択則** により異なるパリティの状態間を結ぶ。

$$\pi|nljm\rangle = (-1)^l|nljm\rangle$$

であるから、$l-l'=$ 奇数 の場合のみ行列要素はゼロでない。

他の制約
摂動ポテンシャル V のなかのデルタ関数のために、$R_{nl}(r = 0) \neq 0$、または $R_{n'l'}(r = 0) \neq 0$ の場合にのみ行列要素がゼロでない。パリティ選択則も考慮すれば、$l = 0, l' = 1$ または $l = 1, l' = 0$ である必要がある。

以上の条件をまとめると、

$$\langle l' = 0, j' = 1/2, m' = \pm 1/2 | V | l = 1, j = 1/2, m = \pm 1/2 \rangle$$
$$\langle l = 0, j = 1/2, m = \pm 1/2 | V | l' = 1, j' = 1/2, m' = \pm 1/2 \rangle$$

（複号同順）

のみが、ゼロでない。

問 6

a. $\Phi(\boldsymbol{x}\,,t)$ をスピンを持たない粒子の、3 次元平面波に対応する波動関数とする。$\Phi^*(\boldsymbol{x}\,,-t)$ は **運動量** の向きが逆転した平面波の波動関数であることを示せ。

b. $\chi(\hat{\boldsymbol{n}}\,)$ を演算子 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有値 +1 の、2 成分固有スピノルとする。$\chi(\hat{\boldsymbol{n}}\,)$ の具体的な形を用いて（$\hat{\boldsymbol{n}}$ の向きを表す z- 軸となす角 β と方位角 α を用いて）、$-i\sigma_2\chi^*(\hat{\boldsymbol{n}}\,)$ がスピンの向きを逆転した 2 成分固有スピノルであることを確かめよ。

［解答］ a.

$$
\begin{aligned}
\phi_p(\boldsymbol{x}\,,t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(i\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}\cdot\boldsymbol{x}\; - i\frac{E}{\hbar}t\right)\\
\phi_p^*(\boldsymbol{x}\,,-t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(-i\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}\cdot\boldsymbol{x}\; + i\frac{E}{\hbar}(-t)\right)\\
\phi_{-p}(\boldsymbol{x}\,,t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(i\frac{-\boldsymbol{p}}{\hbar}\cdot\boldsymbol{x}\; - i\frac{E}{\hbar}t\right)\\
\therefore \phi_p^*(\boldsymbol{x}\,,-t) &= \phi_{-p}(\boldsymbol{x}\,,t)
\end{aligned}
$$

b. 第 1 章の問 9 より、二成分スピノル $\chi(\hat{\boldsymbol{n}}\,)$ の具体形は

$$
\chi_+(\hat{\boldsymbol{n}}\,) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2}\cos\frac{\beta}{2} \\ e^{i\alpha/2}\sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}
\chi_-(\hat{\boldsymbol{n}}\,) = \begin{pmatrix} -e^{-i\alpha/2}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\alpha/2}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}
$$

であるから、

$$
\begin{aligned}
-i\sigma_2\chi_+^*(\hat{\boldsymbol{n}}\,) &= -i\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{i\alpha/2}\cos\frac{\beta}{2} \\ e^{-i\alpha/2}\sin\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix} -e^{-i\alpha/2}\sin\frac{\beta}{2} \\ e^{i\alpha/2}\cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}\\
&= \chi_-(\hat{\boldsymbol{n}}\,)
\end{aligned}
$$

問 7

a. ハミルトニアンが **時間反転** に対して不変であることを仮定して、スピンを持たない **縮退** していない系の波動関数はどんな瞬間でも常に実数に選べることを証明せよ。

b. 平面波状態の波動関数は $t=0$ で、複素関数 $e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}$ で与えられる。これはなぜ時間反転不変性に違反しないのか。

［解答］

a.　スピンを持たない縮退していない系のエネルギー固有関数は、実数にとれる（教科書 4 章）。時刻 $t=0$ の固有関数を $\phi(\boldsymbol{x})$、固有エネルギーを E とすると、時刻 t の波動関数は $\phi(\boldsymbol{x},t)=\phi(\boldsymbol{x})e^{-iEt/\hbar}$ となる。したがって、共通な **位相因子** をべつにして任意の時刻で波動関数を実数に選べる。

b.　固有エネルギー $E_{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}^2/2m$ は、$\boldsymbol{p}$ の向きについて縮退している。

問 8　$\phi(\boldsymbol{p}')$ を状態 $|\alpha\rangle$ の **運動量空間の波動関数**、すなわち、$\phi(\boldsymbol{p}')=\langle\boldsymbol{p}'|\alpha\rangle$ とする。**時間反転** した状態 $\Theta|\alpha\rangle$ の運動量空間の波動関数は、$\phi(\boldsymbol{p}'),\phi(-\boldsymbol{p}'),\phi^*(\boldsymbol{p}'),\phi^*(-\boldsymbol{p}')$ の中のどれで与えられるか、答えが正しいことを説明せよ。

［解答］

$$
\begin{aligned}
\langle\boldsymbol{p}'|\Theta|\alpha\rangle &= \int d\boldsymbol{p}''\langle\boldsymbol{p}'|\Theta\left(|\boldsymbol{p}''\rangle\langle\boldsymbol{p}''|\alpha\rangle\right) \\
&= \int d\boldsymbol{p}''\langle\boldsymbol{p}'|-\boldsymbol{p}''\rangle\langle\boldsymbol{p}''|\alpha\rangle^* \\
&= \int d\boldsymbol{p}''\delta(\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{p}'')\langle\boldsymbol{p}''|\alpha\rangle^* \\
&= \langle-\boldsymbol{p}'|\alpha\rangle^* = \phi_\alpha^*(-\boldsymbol{p}')
\end{aligned}
$$

問 9

a. $\mathcal{D}(\cdot R)|j,m\rangle$ に対応する **時間反転** した状態は何か。

b. 時間反転と **回転** 操作の性質を用いて

$$\mathcal{D}^{(j)*}_{m'm}(R) = (-1)^{m-m'}\mathcal{D}^{(j)}_{-m'-m}(R)$$

を証明せよ。

c. $\Theta|j,m\rangle = i^{2m}|j,-m\rangle$ を証明せよ。

［解答］

a. この問題の **c** の結果を仮定して使おう。 $\Theta \boldsymbol{J}\ \Theta^{-1} = -\boldsymbol{J}$ および、時間反転 Θ で i が $-i$ に置き換わることに注意すると $\mathcal{D}(R) = \exp\left(-\dfrac{i\boldsymbol{J}\ \cdot \boldsymbol{n}}{\hbar}\right)$ より、

$$\Theta\mathcal{D}(R)\Theta^{-1} = \exp\left(-\frac{(-i)(-\boldsymbol{J}\ )\cdot \boldsymbol{n}}{\hbar}\right) = \mathcal{D}(R)$$

となるので、回転と時間反転は交換する

$$[\Theta, \mathcal{D}(R)] = 0$$

したがって、

$$\Theta\mathcal{D}(R)|jm\rangle = \mathcal{D}(R)\Theta|jm\rangle = i^{2m}\mathcal{D}(R)|j,-m\rangle$$

を得る。

b. **a.** の結果を使うと、

$$\langle j,-m'|\Theta\mathcal{D}(R)|jm\rangle = i^{2m}\langle j,-m'|\mathcal{D}(R)|j,-m\rangle = i^{2m}\mathcal{D}^{(j)}_{-m'-m}(R)$$

となる。一方、

$$\langle j,-m'|\Theta\mathcal{D}(R)|jm\rangle = \sum_{m''}\langle j,-m'|\Theta|jm''\rangle\langle jm''|\mathcal{D}(R)|jm\rangle = i^{2m'}\mathcal{D}^{(j)*}_{m'm}(R)$$

となるので、（Θ は、右側にある係数の複素共役をとることに注意）

$$\mathcal{D}^{(j)*}_{m'm}(R) = i^{2(m-m')}\mathcal{D}^{(j)}_{-m'-m}(R)$$

を得る。

c. このような関係を満たすようにケットの位相を選ぶことができる。詳しくは、教科書３８２ページから３８５頁を見よ。

問１０　スピンを持たない粒子が、**対称性**がなくエネルギー準位に**縮退**を作らないポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ によって、ある固定された中心に**束縛**されている。**時間反転不変性**を用い、任意のエネルギー固有状態に対して

$$\langle \boldsymbol{L} \rangle = 0$$

を証明せよ。（これは、**軌道角運動量の消失**とよばれている。）このような非縮退固有状態の波動関数が

$$\sum_l \sum_m F_{lm}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

のように展開されたとすると、$F_{lm}(r)$ に対してどのような**位相の制限**がつくか。

［解答］ a.　時間反転不変な系では、固有状態 $|n\rangle$ は

$$H\Theta|n\rangle = \Theta H|n\rangle = E_n\Theta|n\rangle$$

となるので、$|n\rangle$ と $\Theta|n\rangle$ は同じエネルギーを持つ。よって、エネルギー準位に縮退がなければ、位相因子を除いて

$$|n\rangle = \Theta|n\rangle \equiv |\tilde{n}\rangle$$

とおける。**軌道角運動量**演算子 $\boldsymbol{L}$ は、時間反転に関して奇 $\Theta\boldsymbol{L}\,\Theta^{-1} = -\boldsymbol{L}$ であるから、恒等式 (4.4.36) より

$$\begin{aligned}\langle n|\boldsymbol{L}\,|n\rangle &= \langle \tilde{n}|\Theta\boldsymbol{L}\,^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{n}\rangle \\ &= -\langle n|\boldsymbol{L}\,|n\rangle\end{aligned}$$

となり、

$$\langle n|\boldsymbol{L}\,|n\rangle = 0$$

と結論される。結晶中の電子のように、ポテンシャルの対称性が低いときは、軌道角運動量の消失により、軌道磁気モーメントがゼロになることがある。

非縮退固有状態の波動関数を

$$\langle \boldsymbol{r}\,|n\rangle = \sum_l \sum_m F_{lm}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \tag{1}$$

とすると、時間反転した波動関数は

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r}\,|\theta|n\rangle &= \sum_l \sum_m F_{lm}^*(r)\,[Y_l^m(\theta,\phi)]^* \\ &= \sum_l \sum_m F_{lm}^*(r)(-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\phi) \\ &= \sum_l \sum_m F_{l-m}^*(r)(-1)^m Y_l^m(\theta,\phi) \qquad (2)\end{aligned}$$

となる。式 (1) と式 (2) が位相 α を除いて等しいためには

$$F_{lm}(r) = e^{i\alpha}(-1)^m F_{l,-m}^*(r)$$

が成り立つ必要がある。

問１１　**スピン１の系** のハミルトニアンが

$$H = AS_z^2 + B(S_x^2 - S_y^2)$$

で与えられる。この問題を 厳密に 解き規格化されたエネルギー固有状態と固有値を求めよ。（ **スピンに依存するこのようなハミルトニアン** は、固体物理で実際に現れる。）このハミルトニアンは **時間反転** の下で不変であるか。求められた規格化された固有状態は、時間反転の下でどのように変換されるか。

［解答］スピン１の粒子のスピン演算子

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2i} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

を用いれば、

$$H \doteq \hbar^2 \begin{pmatrix} A & 0 & B \\ 0 & 0 & 0 \\ B & 0 & A \end{pmatrix}$$

と書ける。固有方程式は、$E = \lambda\hbar^2$ とおいて

$$\begin{vmatrix} A-\lambda & 0 & B \\ 0 & -\lambda & 0 \\ B & 0 & A-\lambda \end{vmatrix} = \lambda\left[-(A-\lambda)^2 + B^2\right] = 0$$

となる。３つの基底ケット $|m = 0, \pm 1\rangle$ を $|0\rangle, |+\rangle, |-\rangle$ と略記すれば、エネルギー固有値 $E = 0, (A \pm B)\hbar^2$ に対応するケットは

$$|E = 0\rangle = |0\rangle$$

$$|E = \hbar^2(A \pm B)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle)$$

となる。

A, B を実数として $\Theta \boldsymbol{S}\,\Theta^{-1} = -\boldsymbol{S}$ であることに注意すれば、ただちに、ハミルトニアンが時間反転不変であること $\Theta H \Theta^{-1}$ が示される。

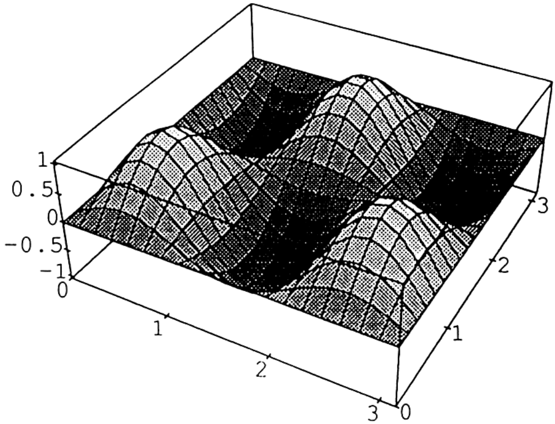
式 (4.4.78)、$\Theta|j, m\rangle = (-1)^m |j, -m\rangle$ より、

$$
\begin{aligned}
\Theta|E = 0\rangle &= \Theta|0\rangle = |E = 0\rangle \\
\Theta|E = \hbar^2(A \pm B)\rangle &= \mp|E = \hbar^2(A \pm B)\rangle
\end{aligned}
$$

のように変換される。

第 5 章

近似法



問 1 **調和振動子**（1 次元）が摂動 $\lambda H_1 = bx$ を受ける。b は実定数である。

a. 基底状態のエネルギーのずれを有限な答えを与える最低次まで計算せよ。

b. この問題を厳密に解き (a.) で得た結果と比較せよ。［証明せずに

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$$

を仮定してよい。］

［解答］

a.

$$\begin{aligned} V_{0k} &= \lambda\langle 0|H_1|k\rangle = b\langle 0|x|k\rangle \\ &= b\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\delta_{0,k-1} \end{aligned}$$

であることに注意すれば、

$$\begin{aligned} \Delta_0^{(1)} &= \lambda\langle 0|H_1|0\rangle = b\langle 0|x|0\rangle = 0 \\ \Delta_0^{(2)} &= \sum_{k\neq 0}\frac{|V_{0k}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \frac{b^2\dfrac{\hbar}{2m\omega}}{\dfrac{1}{2}\hbar\omega - \dfrac{3}{2}\hbar\omega} = -\frac{b^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

となる。

b. 全ハミルトニアンを書き直すと、

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + bx \\ &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x + \frac{b}{m\omega^2})^2 - \frac{b^2}{2m\omega^2} \end{aligned}$$

となって、原点の x- 座標を $(-b/m\omega^2)$、エネルギーを $(-b^2/2m\omega^2)$ だけずらした調和振動子のハミルトニアンになる。よって、すべてのエネルギー固有状態のエネルギーは $(-b^2/2m\omega^2)$ だけ下がる。

問 2　縮退がなく時間を含まない摂動論で、摂動を受けたエネルギー固有状態 $|k\rangle$ の中に対応する無摂動固有状態 $|k^{(0)}\rangle$ を見いだす **確率** はいくらか。これを g^2 （摂動の 2 次）の項まで求めよ。

［解答］ $|k\rangle$ の中に対応する無摂動固有状態 $|k^{(0)}\rangle$ を見いだす確率は、他の状態を見いだす確率を 1 から引いたものだから、g^2 までとって

$$Z_k = 1 - g^2 \sum_{j\neq k} \frac{|V_{jk}|}{(E_k^{(0)} - E_j^{(0)})^2}$$

となる。

【別解】 非摂動状態のケットを $|k^{(0)}\rangle$、$\langle k^{(0)}|k\rangle = 1$ に規格化された摂動状態のケットを $|k\rangle$、${}_N\langle k|k\rangle_N = 1$ に規格化された摂動状態のケットを $|k\rangle_N$ とおく。さらに、規格化定数 Z_k を

$$|k\rangle_N = Z_k^{1/2}|k\rangle$$

で定義すれば、摂動を受けたエネルギー固有状態の中に無摂動固有状態を見いだす確率は、

$$|\langle k^{(0)}|k\rangle_N|^2 = Z_k$$

となる。したがって、規格化定数 Z_k をもとめればよい。

規格化条件

$${}_N\langle k|k\rangle_N = Z_k\langle k|k\rangle = 1$$

より、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{Z_k} &= \langle k|k\rangle \\
&= (\langle k^{(0)}| + g\langle k^{(1)}| + g^2\langle k^{(2)}| + \cdots)(|k^{(0)}\rangle + g|k^{(1)}\rangle + g^2|k^{(2)}\rangle + \cdots) \\
&= 1 + g^2\langle k^{(1)}|k^{(1)}\rangle + O(g^3)
\end{aligned}$$

となる。したがって、g^2 の項まで考慮すると

$$\begin{aligned}
Z_k &= \frac{1}{1 + g^2\langle k^{(1)}|k^{(1)}\rangle} = 1 - g^2\langle k^{(1)}|k^{(1)}\rangle \\
&= 1 - g^2 \left(\sum_{l\neq k} \frac{\langle k^{(0)}|V|l^{(0)}\rangle\langle l^{(0)}|}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} \right) \left(\sum_{m\neq k} \frac{|m^{(0)}\rangle\langle m^{(0)}|V|k^{(0)}\rangle}{E_k^{(0)} - E_m^{(0)}} \right) \\
&= 1 - g^2 \sum_{l\neq k} \frac{|V_{lk}|}{(E_k^{(0)} - E_l^{(0)})^2}
\end{aligned}$$

となる。教科書下巻 404 頁の式 (5.1.48b) を参照。

問3 2次元ポテンシャル

$$V_0 = \begin{cases} 0 & 0 \le x \le L \text{かつ} 0 \le y \le L \\ \infty & \text{他の場合} \end{cases}$$

の中の粒子を考察する。基底状態 および第1励起状態のエネルギー固有関数を表せ。次に、

$$V_1 = \begin{cases} \lambda xy & 0 \le x \le L \text{かつ} 0 \le y \le L \\ 0 & \text{他の場合} \end{cases}$$

の形の時間に依らない摂動を加えた。基底状態および第1励起状態に対して、ゼロ次のエネルギー固有関数と、1次のエネルギー変化を求めよ。

［解答］ 摂動のないときの基底状態は、

$$\langle x, y|0\rangle = \phi_0(x, y) = \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right)$$

となって、縮退はない。第一励起状態は、

$$\begin{aligned} \langle x, y|\alpha\rangle = \phi_\alpha(x, y) &= \frac{2}{L}\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) \\ \langle x, y|\beta\rangle = \phi_\beta(x, y) &= \frac{2}{L}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right) \end{aligned}$$

となって、2重に縮退している。

摂動 V_1 が加わったとき、縮退のない場合の摂動論により基底状態のエネルギー変化は

$$\begin{aligned} \lambda\Delta_0^{(1)} &= \langle 0|\lambda xy|0\rangle \\ &= \lambda\left(\frac{2}{L}\right)^2\int_0^L dx x\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right)\int_0^L dy y\sin^2\left(\frac{\pi}{L}y\right) \\ &= \lambda\frac{L^2}{4} \end{aligned}$$

となる。

第1励起状態のエネルギー変化は、縮退のある場合の摂動論によって与えられる。まず、ケット $|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ を基底にとって、縮退した空間内で

の摂動 V_1 の行列要素を求めると

$$V \doteq \begin{pmatrix} V_{\alpha\alpha} & V_{\alpha\beta} \\ V_{\beta\alpha} & V_{\beta\beta} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} \dfrac{L^2}{4} & \dfrac{256L^2}{81\pi^4} \\ \dfrac{256L^2}{81\pi^4} & \dfrac{L^2}{4} \end{pmatrix}$$

となる。ゼロ次の固有関数は、この行列 V の固有ケットであるから、

$$\begin{aligned} |\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle \pm |\beta\rangle) \\ &\doteq \frac{\sqrt{2}}{L}\left(\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}y\right) \pm \sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}y\right)\right) \end{aligned}$$

となる。1 次のエネルギー変化は、行列 V の固有値であるから、

$$\Delta^{(1)} = \lambda L^2\left(\frac{1}{4} \pm \frac{256}{81\pi^4}\right)$$

となる。

問 4　2 次元の等方的調和振動子を考える。このハミルトニアンは、

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$$

で与えられる。

a. 低い方から 3 番目までの状態のエネルギーはいくらか。縮退はあるか。

b. 次に摂動 $V = \delta m\omega^2 xy$ をかける。ここでは、δ は 1 よりずっと小さい無次元の実数である。低い方から 3 番目までのそれぞれの状態に対して、ゼロ次のエネルギー固有ケットと対応する 1 次のエネルギー［すなわち、(a) で得た無摂動のエネルギーに、1 次のエネルギーのずれを加えたもの］を見いだせ。

c. ハミルトニアンが $H_0 + V$ の問題を厳密に解け。これを (b) で得た摂動の結果と比較せよ。
［$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$ を用いてよい。］

［解答］

a. 低い方から 3 番目までの状態は、$|n_x, n_y\rangle = |0,0\rangle, |1,0\rangle, |0,1\rangle$ であり、対応するエネルギー固有値は

$$\begin{aligned} E_{(0,0)} &= \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega = \hbar\omega \\ E_{(1,0)} &= \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega = 2\hbar\omega \\ E_{(0,1)} &= \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{3}{2}\hbar\omega = 2\hbar\omega \end{aligned}$$

となって、$E_{(1,0)}$ と $E_{(0,1)}$ が縮退している。

b. 基底状態は縮退していないので、縮退のない摂動論が使える。

$$\begin{aligned} \Delta_0^{(1)} &= \langle 0,0|\delta m\omega^2 xy|0,0\rangle \\ &= \delta m\omega^2 \langle n_x = 0|x|n_x = 0\rangle\langle n_y = 0|y|n_y = 0\rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

だから、ゼロ次のエネルギー固有ケットと１次のエネルギーは

$$|0\rangle^{(0)} = |0,0\rangle \quad (E = \hbar\omega)$$

となる。

２番目と３番目のエネルギーは縮退しているので、縮退のある摂動論を用いる。$|1,0\rangle = |\alpha\rangle, |0,1\rangle = |\beta\rangle$ と書くと、摂動ポテンシャルの行列要素は、

$$\begin{aligned}
V_{\alpha\alpha} &= \langle 1,0|\delta m\omega^2 xy|1,0\rangle \\
&= \delta m\omega^2 \langle n_x = 1|x|n_x = 1\rangle\langle n_y = 0|y|n_y = 0\rangle \\
&= 0 \\
V_{\beta\beta} &= 0 \\
V_{\alpha\beta} &= \langle 1,0|\delta m\omega^2 xy|0,1\rangle \\
&= \delta m\omega^2 \langle n_x = 1|x|n_x = 0\rangle\langle n_y = 0|y|n_y = 1\rangle \\
&= \delta m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\delta}{2}\hbar\omega \\
V_{\beta\alpha} &= \frac{\delta}{2}\hbar\omega
\end{aligned}$$

となるので、縮退がある場合の摂動論の式 (5.2.8) は

$$\begin{vmatrix} -\Delta^{(1)} & (\delta/2)\hbar\omega \\ (\delta/2)\hbar\omega & -\Delta^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

となる。よって、エネルギーのずれは $\Delta_{\pm}^{(1)} = \pm(\delta/2)\hbar\omega$ であり、対応するゼロ次のエネルギー固有ケットと１次のエネルギーは

$$\begin{aligned}
|+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) \quad (E = (2 + \frac{\delta}{2})\hbar\omega) \\
|-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle - |\beta\rangle) \quad (E = (2 - \frac{\delta}{2})\hbar\omega)
\end{aligned}$$

となる。

c. 原点を中心に４５度回転させた新しい座標

$$\begin{aligned}
x' &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x + y) \\
y' &= \frac{-1}{\sqrt{2}}(x - y)
\end{aligned}$$

を使って、全ハミルトニアン

$$H = H_0 + V = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) + \delta m\omega^2 xy$$

を書き直すと、

$$H = \frac{p_{x'}^2}{2m} + \frac{1+\delta}{2}m\omega^2 x'^2 + \frac{p_{y'}^2}{2m} + \frac{1-\delta}{2}m\omega^2 y'^2$$

となって、二次元の非等方的調和振動子のハミルトニアンになる。よって、厳密なエネルギー固有値および δ の 1 次まで近似した固有値は

$$\begin{aligned}
E_{(0,0)} &= \frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{1+\delta} + \frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{1-\delta} \approx \hbar\omega \\
E_{(1,0)} &= \frac{3}{2}\hbar\omega\sqrt{1+\delta} + \frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{1-\delta} \approx (2 + \frac{\delta}{2})\hbar\omega \\
E_{(0,1)} &= \frac{1}{2}\hbar\omega\sqrt{1+\delta} + \frac{3}{2}\hbar\omega\sqrt{1-\delta} \approx (2 - \frac{\delta}{2})\hbar\omega
\end{aligned}$$

となって、δ の 1 次まで (b) の結果と一致する。

問 5　教科書の式 (5.1.50)

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

によって与えられる 1 次元 調和振動子 に、摂動 $V = \frac{1}{2}\epsilon m\omega^2 x^2$ が加わったとき、(5.1.54) 式

$$V_{00} = \frac{\epsilon\hbar\omega}{4}, \quad V_{20} = \frac{\epsilon\hbar\omega}{2\sqrt{2}}$$

が成り立つことを確かめよ。他の行列要素 V_{k0} はすべてゼロになることを示せ。

[解答] 演算子 x を 生成消滅演算子 で表すと、

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$$

となるので、

$$\begin{aligned}
x^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(aa + a^\dagger a^\dagger + aa^\dagger + a^\dagger a) \\
x^2|0\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}(|0\rangle + \sqrt{2}|2\rangle) \\
\langle n|x^2|0\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}(\delta_{n0} + \sqrt{2}\delta_{n2}) \\
V_{n0} &= \frac{\epsilon m\omega^2}{2}\langle n|x^2|0\rangle \\
&= \frac{\epsilon\hbar\omega}{4}(\delta_{n0} + \sqrt{2}\delta_{n2})
\end{aligned}$$

を得る。

問 6　二つの対称的な長方形の **井戸型ポテンシャル**

$$V = \begin{cases} \infty, & |x| > a+b \\ 0, & a < |x| < a+b \\ V_0(>0), & |x| < a \end{cases}$$

を考える。V_0 が低励起状態の量子化エネルギーにくらべて非常に高いとして、最もエネルギーが低い二つの状態間のエネルギー間隔を表す近似的な式を求めよ。

［解答］井戸型ポテンシャルの問題なので厳密にシュレーディンガー方程式が解ける。波動関数は **パリティ固有状態** であるから、波動関数が対称な場合と **反対称** な場合に分けて考える。

境界条件 $\phi(-a-b) = \phi(a+b) = 0$ を考慮すれば対称な波動関数は、図の領域 1 、 2 、 3 にたいして

$$\phi_+(x) = \begin{cases} \phi_+^{(1)}(x) &=& A\sin k(x+a+b) \\ \phi_+^{(2)}(x) &=& B\cosh \kappa x \\ \phi_+^{(3)}(x) &=& A\sin k(-x+a+b) \end{cases}$$

となる。ただし、

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$$

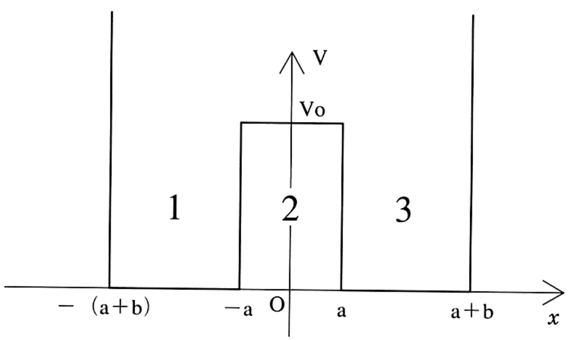


図 5.1: 井戸型ポテンシャルの図

とおいた。$x = \pm a$ での接続条件は、

$$\begin{aligned} A\sin kb &= B\cosh\kappa a \\ Ak\cos kb &= -B\kappa\sinh\kappa a \end{aligned}$$

をみたす $(A, B) \neq (0, 0)$ が存在することである。したがって、方程式

$$\begin{vmatrix} \sin kb & -\cosh\kappa a \\ k\cos kb & \kappa\sinh\kappa a \end{vmatrix} = 0$$

すなわち

$$\tan k_+ b = -\frac{k_+}{\kappa_+}\coth\kappa_+ a \qquad (1)$$

をみたすエネルギー $E_+ = \hbar^2 k_+^2/2m$ がエネルギー固有値となる。じっさい、ポテンシャル壁が無限に高い場合（$V_0 = \infty$ のとき）、上式の右辺はゼロになるので、

$$\begin{aligned} k_+ &= \frac{n\pi}{b} \\ E_+ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 \end{aligned}$$

となって、期待される結果をえる。

反対称な波動関数も同様にして

$$\phi_-(x) = \begin{cases} \phi_-^{(1)}(x) &= A\sin k(x + a + b) \\ \phi_-^{(2)}(x) &= B\sinh\kappa x \\ \phi_-^{(3)}(x) &= -A\sin k(-x + a + b) \end{cases}$$

となる。$x = \pm a$ での接続条件は、

$$\begin{aligned} A\sin kb &= -B\sinh\kappa a \\ Ak\cos kb &= B\kappa\cosh\kappa a \end{aligned}$$

をみたす $(A, B) \neq (0, 0)$ が存在することである。したがって、方程式

$$\begin{vmatrix} \sin kb & \sinh\kappa a \\ k\cos kb & -\kappa\cosh\kappa a \end{vmatrix} = 0$$

すなわち

$$\tan k_- b = -\frac{k_-}{\kappa_-}\tanh\kappa_- a \qquad (2)$$

をみたすエネルギー $E_- = \hbar^2 k_-^2/2m$ がエネルギー固有値となる。じっさい、ポテンシャル壁が無限に高い場合（$V_0 = \infty$ のとき）、上式の右辺はゼロになるので、

$$\begin{aligned} k_- &= \frac{n\pi}{b} \\ E_- &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 \end{aligned}$$

となる。したがって、壁が無限のときすべての状態 n にたいして $E_+ = E_-$ となりエネルギーが 2 重に **縮退** している。

さて、壁の高さが無限大から有限であるが $V_0 \gg E$ を満たす大きさに変化したときのエネルギー固有値の変化を調べよう。

この条件では $\kappa_\pm a \gg 1, k_\pm/\kappa_\pm \ll 1$ と考えられるから、

$$\begin{aligned} k_\pm &= \frac{n\pi}{b} + \Delta k_\pm \\ \Delta E_\pm &= \frac{\hbar^2 k_\pm}{m}\Delta k_\pm \end{aligned}$$

とおいて、式 (1)、(2) に代入すれば、$n = 1$ に対して

$$\begin{aligned} \Delta k_+ b &= -\frac{k}{\kappa}\coth \kappa a \\ \Delta k_- b &= -\frac{k}{\kappa}\tanh \kappa a \end{aligned}$$

となるので、

$$E_\pm = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{b}\right)^2\left(1 - \frac{2}{\kappa b} \mp \frac{4}{\kappa b}e^{-2\kappa a}\right)$$

をえる。この表式の第 1 項は、あきらかに壁が無限大のときのエネルギーである。第 2 項は、壁の高さが有限になったため左右の部屋の大きさが事実上 $b + 1/\kappa$ に広がった効果をあらわす。

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{b+1/\kappa}\right)^2 \approx \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{b}\right)^2(1 - \frac{2}{\kappa b})$$

第 3 項は、 **トンネル効果** によって基底状態の縮退が解かれていることを示す。この項がトンネル効果をあらわすことは、トンネル効果をあらわす **半古典近似** の因子

$$\exp\left(\frac{-1}{\hbar}\int dx\sqrt{V(x) - E}\right) \approx \exp\left(-2\kappa a\right)$$

を含むことからもわかる。

以上の考察から、もっともエネルギーの低い状態間のエネルギー間隔は、

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{b}\right)^2 \frac{8}{\kappa b} e^{-2\kappa a}$$

となる。

この問題は、第2章の問9で扱った、トンネル効果の問題と似ている。

問7　基底状態に **縮退** のない一電子原子が、z- 方向の一様な電場中に置かれている。基底状態で誘起された **電気双極子モーメント** を表す近似的表式を、摂動の1次まで計算した状態ベクトルに関する ez の **期待値** から求めよ。同じ表式が2次まで計算した **基底状態のエネルギー変化** $\Delta = -\alpha|\boldsymbol{E}|^2/2$ からも得られることを示せ。（注：α は分極率を表す。）スピンは無視せよ。

［解答］まず、1次の状態ベクトルから、電気双極子モーメント μ_{el} を求めよう。摂動ポテンシャル $V = -eE_z z$ があるときの状態ケットは、摂動の1次まで考えれば

$$|0\rangle = |0^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq 0} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{k0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}$$
$$V_{k0} = -eE_z\langle k^{(0)}|z|0^{(0)}\rangle$$

となる。したがって、電気双極子モーメント μ_{el} は

$$\begin{aligned}\mu_{el} &= \langle 0|ez|0\rangle \\ &\approx \langle 0^{(0)}|ez|0^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq 0}\frac{V_{0k}\langle k^{(0)}|ez|0^{(0)}\rangle}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \sum_{k'\neq 0}\frac{\langle 0^{(0)}|ez|k'^{(0)}\rangle V_{k'0}}{E_0^{(0)} - E_{k'}^{(0)}} \\ &= \sum_{k\neq 0}\frac{-2e^2|\langle k^{(0)}|z|0^{(0)}\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \times E_z\end{aligned}$$

となる。ただし、$\langle 0^{(0)}|ez|0^{(0)}\rangle = 0$ となることを使った。また、k についての和は、 **ウィグナー・エッカールトの定理** によりゼロにならない行列要素 $V_{k0}[k = (n, l = 1, m = 0)]$ についてとる。

つぎに、摂動の2次のエネルギー変化から求める。

$$\Delta_0^{(2)} = \sum_{k\neq 0}\frac{|V_{0k}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} = \sum_{k\neq 0}\frac{e^2|\langle k^{(0)}|z|0^{(0)}\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \times |E_z|^2$$

であるから、$\Delta = -\alpha|\boldsymbol{E}|^2/2$ より、分極率 α は

$$\alpha = \sum_{k\neq 0}\frac{-2e^2|\langle k^{(0)}|z|0^{(0)}\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

となる。電気双極子モーメントは

$$\mu_{el} = \alpha E_z = \sum_{k\neq 0}\frac{-2e^2|\langle k^{(0)}|z|0^{(0)}\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \times E_z$$

となって、ez の期待値から求めたものと一致する。

問 8　下記の行列要素（期待値）を計算せよ。もしそれがゼロになるときは、なぜゼロになったか簡単な **対称性** の（または他の）議論を用いて説明せよ。

a. $\langle n'=2,l'=1,m'=0|x|n=2,l=0,m=0\rangle$.

b. $\langle n'=2,l'=1,m'=0|p_z|n=2,l=0,m=0\rangle$.
［(a),(b) で $|nlm\rangle$ は、スピンを無視した非相対論的水素原子のエネルギー固有ケットを表す。］

c. 中心力の場の中にある $j=9/2$,$m=7/2$,$l=4$ の電子の $\langle L_z\rangle$.

d. s- 状態の **ポジトロニウム** に対して
$\langle$一重項$, m_s'=0|(S_z^{(e-)}-S_z^{(e+)})|$三重項$, m_s=0\rangle$

e. **水素分子** の **基底状態** に対して $\langle \boldsymbol{S}_{(1)}\cdot\boldsymbol{S}_{(2)}\rangle$.

［解答］

a. $\langle n'=2,l'=1,m'=0|x|n=2,l=0,m=0\rangle=0$ となる。なぜなら、x を **球面調和関数** で表すと、

$$x=\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\frac{Y_1^{-1}-Y_1^{+1}}{\sqrt{2}}r$$

であるから、 **m選択則** により $m'-m=\pm1$ 以外は 0 になるからである。

b. $\langle n'=2,l'=1,m'=0|p_z|n=2,l=0,m=0\rangle=0$ となる。

一般に、ハミルトニアンが

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^{\,2}}{2m}+V(\boldsymbol{x}\,)$$

の形にかけるとき、 **基本的交換関係**　$[x_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}$ より

$$\boldsymbol{p}\;=\frac{m}{i\hbar}[\boldsymbol{x}\,,H]$$

とかけるので、ケット $|\alpha\rangle,|\beta\rangle$ をハミルトニアン H の固有ケットとすれば、

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\boldsymbol{p}\;|\beta\rangle &= \frac{m}{i\hbar}\langle\alpha|[\boldsymbol{x}\,,H]|\beta\rangle=\frac{m}{i\hbar}\langle\alpha|\boldsymbol{x}\;H-H\boldsymbol{x}\;|\beta\rangle\\ &= \frac{m}{i\hbar}(E_\beta-E_\alpha)\langle\alpha|\boldsymbol{x}\;|\beta\rangle\end{aligned}$$

となる。よって、

$$\begin{aligned}&\langle n'=2,l'=1,m'=0|p_z|n=2,l=0,m=0\rangle\\ =\ &\frac{m}{i\hbar}(E_n-E_{n'})\langle n'=2,l'=1,m'=0|z|n=2,l=0,m=0\rangle=0\end{aligned}$$

を得る。

c. $l=4, s=1/2$ として与えられた全角運動量の固有ケット $|j=9/2, m=7/2\rangle$ を、L_z と S_z の同時固有ケット $|m_l m_s\rangle$ で展開して計算する。

$$\begin{aligned}\langle jm|L_z|jm\rangle &= \sum_{m_l}\sum_{m_s}\langle jm|L_z|m_l m_s\rangle\langle m_l m_s|jm\rangle\\ &= \sum_{m_l}\sum_{m_s}\hbar m_l|\langle m_l m_s|jm\rangle|^2\end{aligned}$$

ここで、**クレプシュ・ゴルダン係数** の **m選択則** $m_l+m_s=m=7/2$ を用いれば、

$$\begin{aligned}&= 3\hbar\times|\langle m_l=3,m_s=+1/2|j=9/2,m=7/2\rangle|^2\\ &\quad +4\hbar\times|\langle m_l=4,m_s=-1/2|j=9/2,m=7/2\rangle|^2\\ &= 3\hbar\times\frac{l+m+1/2}{2l+1}+4\hbar\times\frac{l-m+1/2}{2l+1}=\frac{28}{9}\hbar\end{aligned}$$

を得る。

d.

$$\begin{aligned}&\langle 一重項, m_s'=0|(S_z^{(e-)}-S_z^{(e+)})|三重項, m_s=0\rangle\\ =\ &\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle +-|-\langle -+|)(S_z^{(e-)}-S_z^{(e+)})\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle)=\hbar\end{aligned}$$

e. 水素分子の基底状態は **スピン一重項状態** だから、

$$\begin{aligned}&\langle \boldsymbol{S}_{(1)}\cdot\boldsymbol{S}_{(2)}\rangle\\ =\ &\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle +-|-\langle -+|)\frac{1}{2}(\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{S}_{(1)}^2-\boldsymbol{S}_{(2)}^2)\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle-|-+\rangle)=-\frac{3\hbar^2}{4}\end{aligned}$$

となる。

問 9　$|n, l=1, m=\pm1, 0\rangle$（スピンは無視）で表される p- 軌道の電子が、ポテンシャル

$$V=\lambda(x^2-y^2) \qquad (\lambda=\text{一定})$$

を受けている。
a. この摂動を対角化する「正しい」ゼロ次のエネルギー固有状態を求めよ。エネルギーの変化を詳しく計算する必要はないが、はじめの **三重縮退** がいま完全に解けていることを示せ。

b. V は **時間反転** の下で不変であり、もはや縮退は全くないから、(a) で得られたエネルギー固有状態の各々は時間反転操作を受けると、（**位相因子** ないし符号は別にして）自分自身に移ることが期待される。この点を具体的に確かめよ。

［解答］

a. $|n, l=1, m=\pm1, 0\rangle$ を $|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle$ と略記して、縮退のある場合の摂動論を用いよう。

摂動ポテンシャル V は、

$$\begin{aligned} V=\lambda(x^2-y^2) &= \lambda r^2 \sin^2\theta(\cos^2\phi-\sin^2\phi) \\ &= \lambda r^2 \sin^2\theta \cos 2\phi \\ &= \frac{\lambda r^2}{2}(\sin^2\theta e^{+2i\phi}+\sin^2\theta e^{-2i\phi}) \\ &= \frac{\lambda r^2}{2}\sqrt{\frac{32\pi}{15}}(Y_2^{+2}+Y_2^{-2}) \end{aligned}$$

となって、階数 2 で磁気量子数 ±2 の **球面テンソル** のように振舞う。したがって、摂動 V の行列要素は

$$\langle+|V|-\rangle=\langle-|V|+\rangle=v\neq0$$

以外ゼロになるので、固有方程式は、

$$\begin{vmatrix} -\Delta & 0 & v \\ 0 & -\Delta & 0 \\ v & 0 & -\Delta \end{vmatrix} = -\Delta(\Delta+v)(\Delta-v)=0$$

よって、エネルギーのずれは、 $\Delta = \pm v, 0$ となって三重縮退が完全に解けている。対応する固有ケットは

$$\begin{aligned} |\Delta = +v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \\ |\Delta = 0\rangle &= |0\rangle \\ |\Delta = -v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \end{aligned}$$

である。

b. 時間反転演算子 Θ に対して、教科書の式 (4.4.78) より $\Theta|j,m\rangle = (-1)^m|j,-m$ となるから

$$\begin{aligned} \Theta|+\rangle &= -|-\rangle \\ \Theta|0\rangle &= |0\rangle \\ \Theta|-\rangle &= -|+\rangle \end{aligned}$$

となる。よって

$$\begin{aligned} \Theta|\Delta = +v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Theta|+\rangle + \Theta|-\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|-\rangle - |+\rangle) = -|\Delta = +v\rangle \\ \Theta|\Delta = 0\rangle &= |0\rangle = |\Delta = 0\rangle \\ \Theta|\Delta = -v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\Theta|+\rangle - \Theta|-\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|-\rangle + |+\rangle) = |\Delta = -v\rangle \end{aligned}$$

のように、自分自身に移る。

問１０　２次元の無限に深い四角なポテンシャル

$$V_0 = \begin{cases} 0 & |x| \leq a \text{かつ} |y| \leq a \\ \infty & \text{他の場合} \end{cases}$$

の中にあるスピンのない粒子を考察する。

a. 下から３番目までの状態のエネルギー固有値はいくらか。 **縮退** はあるか。

b. 次にポテンシャル

$$V_1 = \lambda xy \quad |x| \leq a \text{かつ} |y| \leq a$$

を加える。これを弱い摂動として以下の問に答えよ。

1. 三つの状態のそれぞれについて、摂動によるエネルギー変化は λ に関して１次か２次か。
2. 下から３番目までの状態のエネルギー変化に対する表式を、λ のオーダーまで正確に求めよ。（現れる積分を計算する必要はない。）
3. この三つのエネルギー状態にたいして、摂動があるときとないときのエネルギーの図を描け。どの無摂動状態が、どの摂動状態と結びつくかが明らかになるように注意せよ。

［解答］

a. エネルギー固有関数は

$$\langle x, y|m, n\rangle = \phi_{mn}(x, y) = \frac{1}{a} \sin\left[\frac{m\pi}{2a}(x + a)\right] \sin\left[\frac{n\pi}{2a}(y + a)\right]$$

エネルギー固有値は

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2}{2M}\left[\left(\frac{m\pi}{2a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{2a}\right)^2\right] = \frac{\pi^2\hbar^2}{8Ma^2}(m^2 + n^2) \quad m, n = 1, 2, 3, \cdots$$

となる。

下から 3 番目までのエネルギー固有値 E_i と縮退度 g_i は、

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{1}{4}\frac{\pi^2\hbar^2}{Ma^2}, \quad (n,m) = (1,1); \qquad g_1 = 1 \\
E_2 &= \frac{5}{8}\frac{\pi^2\hbar^2}{Ma^2}, \quad (n,m) = (1,2),(2,1); \quad g_2 = 2 \\
E_3 &= \frac{\pi^2\hbar^2}{Ma^2}, \quad (n,m) = (2,2); \qquad g_3 = 1
\end{aligned}$$

となる。

b. $|E_1\rangle$ と $|E_3\rangle$ は縮退度が 1 なので縮退のないときの摂動論が使える。$|E_2\rangle$ は縮退度が 2 なので縮退のあるときの摂動論を使う必要がある。

まず、エネルギー固有関数の x 軸と y 軸の反転に対する対称性を使って、摂動ポテンシャルのゼロになる行列要素を調べよう。行列要素は、

$$\begin{aligned}
V_{(m'n'),(mn)} &= \lambda\langle m'n'|xy|mn\rangle \\
&= \frac{\lambda}{a^2}\int_{-a}^{a} dx\ x\sin\left[\frac{m'\pi}{2a}(x+a)\right]\sin\left[\frac{m\pi}{2a}(x+a)\right] \\
&\quad \times\int_{-a}^{a} dy\ y\sin\left[\frac{n'\pi}{2a}(y+a)\right]\sin\left[\frac{n\pi}{2a}(y+a)\right] \qquad (1)
\end{aligned}$$

だから、$(m'-m) =$ 偶数 または $(n'-n) =$ 偶数 のときにゼロになる。

$E = E_1$ の状態について、摂動によるエネルギー変化は

$$\begin{aligned}
\Delta_1^{(1)} &= \langle 1,1|V|1,1\rangle = 0 \\
\Delta_1^{(2)} &= \sum_{(mn)\neq(11)} \frac{|\langle 1,1|V|n,m\rangle|^2}{E_{11}-E_{(nm)}} \neq 0
\end{aligned}$$

となるので、λ に関して 2 次である。

$E = E_3$ の状態についても、摂動によるエネルギー変化は

$$\begin{aligned}
\Delta_3^{(1)} &= \langle 2,2|V|2,2\rangle = 0 \\
\Delta_3^{(2)} &= \sum_{(mn)\neq(22)} \frac{|\langle 2,2|V|n,m\rangle|^2}{E_{22}-E_{(nm)}} \neq 0
\end{aligned}$$

となるので、λ に関して 2 次である。

$E = E_2$ の状態は 2 重に縮退しているので、縮退のないときの摂動論を用いる。式 (1) より、縮退している空間での摂動ポテンシャルの行列要素

は

$$V \doteq \begin{array}{c} \begin{matrix} (1,2) & (2,1) \end{matrix} \\ \left[\begin{matrix} 0 & v \\ v & 0 \end{matrix} \right] \end{array}$$

となる。ただし、

$$v = \lambda \frac{1024a^2}{81\pi^4}$$

である。したがって、1 次のエネルギー変化と 0 次の「正しい」エネルギー固有ケットは

$$\begin{aligned} \Delta_2^{(1)} &= \pm v \neq 0 \\ |E_2^{(0)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,2\rangle \pm |2,1\rangle) \end{aligned}$$

となり、エネルギー変化は λ に関して 1 次である。

問１１　二準位系のハミルトニアン行列は

$$H \doteq \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^0 \end{pmatrix}$$

のように表すことができる。摂動のない問題（$\lambda = 0$）に対するエネルギー固有関数は、明らかに

$$\phi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \phi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で与えられる。

a. この問題を厳密に解き、エネルギー固有関数 ϕ_1, ϕ_2 とエネルギー固有値 E_1, E_2 を見いだせ。

b. $\lambda|\Delta| \ll |E_1^0 - E_2^0|$ を仮定し、同じ問題を時間を含まない摂動論を用いて解け。エネルギー固有関数については１次まで、エネルギー固有値については２次まで求めよ。(a) で求めた厳密な結果と比較せよ。

c. 二つの無摂動エネルギーが「**ほとんど縮退**」している、すなわち

$$|E_1^0 - E_2^0| \ll \lambda|\Delta|$$

であると仮定しよう。(a) で得られた厳密な結果は、E_1^0 を厳密に E_2^0 と等しく置き、この問題に縮退のある摂動論を適用したとき期待できる解と、よく似ていることを示せ。

［解答］

a. 第１章の問１１で $H_{11} = E_1^0$、$H_{22} = E_2^0$、$H_{12} = \lambda\Delta$ と置けばよい。エネルギー固有ケットとエネルギー固有値は、

$$\begin{aligned} |\phi_1\rangle &= \cos\frac{\beta}{2}|\phi_1^{(0)}\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|\phi_2^{(0)}\rangle \\ E_1 &= \frac{E_1^0 + E_2^0}{2} + \sqrt{\left(\frac{E_1^0 - E_2^0}{2}\right)^2 + (\lambda\Delta)^2} \\ |\phi_2\rangle &= -\sin\frac{\beta}{2}|\phi_1^{(0)}\rangle + \cos\frac{\beta}{2}|\phi_2^{(0)}\rangle \\ E_2 &= \frac{E_1^0 + E_2^0}{2} - \sqrt{\left(\frac{E_1^0 - E_2^0}{2}\right)^2 + (\lambda\Delta)^2} \end{aligned}$$

ただし、

$$\cos\beta = \frac{E_1^0 - E_2^0}{2\sqrt{\left(\dfrac{E_1^0 - E_2^0}{2}\right)^2 + (\lambda\Delta)^2}}$$

である。

b. $\lambda|\Delta| \ll |E_1^0 - E_2^0|$ なので、$\Delta > 0$ と仮定して、縮退していない場合の摂動論を用いると、$V_{12} = V_{21} = \lambda\Delta$ より、$\Delta > 0$ をとして

$$\begin{aligned}
|\phi_1^{(1)}\rangle &= |\phi_1^{(0)}\rangle + \frac{\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}|\phi_2^0\rangle \\
\Delta_1^{(2)} &= +\frac{(\lambda\Delta)^2}{E_1^0 - E_2^0} \\
|\phi_2^{(1)}\rangle &= |\phi_2^{(0)}\rangle - \frac{\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}|\phi_1^0\rangle \\
\Delta_2^{(2)} &= -\frac{(\lambda\Delta)^2}{E_1^0 - E_2^0}
\end{aligned}$$

を得る。

$E_1^0 > E_2^0$ として、(a) で求めた結果を λ について 1 次まで展開すると

$$\sqrt{\left(\frac{E_1^0 - E_2^0}{2}\right)^2 + (\lambda\Delta)^2} \approx \frac{E_1^0 - E_2^0}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\left(\frac{2\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}\right)^2\right)$$

$$\cos\beta \approx 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{2\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}\right)^2$$

$$\beta \approx \frac{2\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}$$

$$\cos\frac{\beta}{2} \approx 1, \quad \sin\frac{\beta}{2} \approx \frac{\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}$$

であるから、

$$\begin{aligned}
|\phi_1^{(1)}\rangle &= |\phi_1^{(0)}\rangle + \frac{\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}|\phi_2^0\rangle \\
E_1 &= E_1^0 + \frac{(\lambda\Delta)^2}{E_1^0 - E_2^0} \\
|\phi_2^{(1)}\rangle &= |\phi_2^{(0)}\rangle - \frac{\lambda\Delta}{E_1^0 - E_2^0}|\phi_1^0\rangle \\
E_2 &= E_2^0 - \frac{(\lambda\Delta)^2}{E_1^0 - E_2^0}
\end{aligned}$$

となって、(b) で得た結果と一致する。

c. $E_1^0 = E_2^0$ として縮退のあるときの摂動論を用いると、摂動ポテンシャルは

$$V = \begin{pmatrix} 0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & 0 \end{pmatrix}$$

となり、固有方程式

$$\begin{vmatrix} -E^{(1)} & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & -E^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

より、正しい固有ケット、固有値

$$\begin{aligned}
|\varphi_1^{(0)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1^{(0)}\rangle + |\phi_2^{(0)}\rangle) \\
E_1 &= E_1^0 + \lambda\Delta \\
|\varphi_2^{(0)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|\phi_1^{(0)}\rangle + |\phi_2^{(0)}\rangle) \\
E_2 &= E_1^0 - \lambda\Delta
\end{aligned}$$

を得る。

(a) で求めた結果を $|E_1^0 - E_2^0|/\lambda\Delta$ について展開すると $\beta \sim \pi$ となって

$$\begin{aligned}
|\varphi_1^{(0)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi_1^{(0)}\rangle + |\phi_2^{(0)}\rangle) \\
E_1 &= \frac{E_1^0 + E_2^0}{2} + \lambda\Delta \\
|\varphi_2^{(0)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-|\phi_1^{(0)}\rangle + |\phi_2^{(0)}\rangle) \\
E_2 &= \frac{E_1^0 + E_2^0}{2} - \lambda\Delta
\end{aligned}$$

となって、$E_1^0 = E_2^0$ と置けば (c) で得た結果と一致する。

問１２　（この問題は１番目と２番目の状態間の **縮退** が、１次では解けないので扱いにくい問題である。Gottfried 1966,p.397, 問題 1 も参照せよ。）この問題は Schiff 1968, p.295, 問題 4 から転用した。三つの無摂動状態を持つ系が、摂動を受けたハミルトニアン行列

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

で表されている。ここで $E_2 > E_1$ とする。a, b は同じ程度の量で $E_2 - E_1$ に較べて小さく、摂動と見なすことができる。縮退のない２次の摂動論を用いて、摂動を受けた固有値を計算せよ。（これは、正しい手続きか？）次に行列を対角化して厳密な固有値を見いだせ。最後に縮退のある２次の摂動論を用いよ。得られた三つの結果を比較せよ。

【縮退のない場合の摂動論】　無摂動状態のケットを $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle$ とする。

$$V \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a^* & b^* & 0 \end{pmatrix}$$

だから、縮退のない場合の摂動論を無理やり適用すると、

$$\begin{aligned}
E_\alpha &= E_1 + \frac{|V_{\alpha\beta}|^2}{E_1 - E_1} + \frac{|V_{\alpha\gamma}|^2}{E_1 - E_2} \\
&= E_1 + \left(\frac{0}{0}\right) + \frac{|a|^2}{E_1 - E_2} \\
E_\beta &= E_1 + \frac{|V_{\beta\alpha}|^2}{E_1 - E_1} + \frac{|V_{\beta\gamma}|^2}{E_1 - E_2} \\
&= E_1 + \left(\frac{0}{0}\right) + \frac{|b|^2}{E_1 - E_2} \\
E_\gamma &= E_2 + \frac{|V_{\gamma\alpha}|^2}{E_2 - E_1} + \frac{|V_{\gamma\beta}|^2}{E_2 - E_1} \\
&= E_1 + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2 - E_1}
\end{aligned}$$

となって、正しい答はでない。

【厳密解】　固有方程式

$$
\begin{aligned}
&\begin{vmatrix} E_1 - E & 0 & a \\ 0 & E_1 - E & b \\ a^* & b^* & E_2 - E \end{vmatrix} \\
&= (E_1 - E)\left\{(E_1 - E)(E_2 - E) - |a|^2 - |b|^2\right\} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

より、エネルギー固有値は

$$
\begin{aligned}
E_{(0)} &= E_1 \\
E_{(\pm)} &= \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4(|a|^2 + |b|^2)}
\end{aligned}
$$

となる。a, b が $E_2 - E_1$ に比べて小さいとすれば、

$$
\begin{aligned}
E_{(0)} &\sim E_1 \\
E_{(+)} &\sim E_2 + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2 - E_1} \\
E_{(-)} &\sim E_1 - \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2 - E_1}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

を得る。

【縮退のあるときの摂動論】

$|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ が縮退しているから、縮退した空間内での摂動は

$$
V \doteq \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

となる。この行列の固有方程式は $\lambda^2 = 0$ となるので、$|\alpha\rangle$ と $|\beta\rangle$ の縮退は1次の摂動ではとけない。1次の摂動論では、「正しい」0次のベクトル $|l^{(0)}\rangle$ が決まらないので、2次の摂動論を用いる。

まず、縮退が1次で解けない場合の2次の摂動論を、教科書に沿って一般的に考えよう。

摂動 V がかけられる前の非摂動ハミルトニアン H_0 に、同じエネルギー $E_D^{(0)}$ を持つ g 個の固有ケット $\{|m^{(0)}\rangle\}$ が存在していたとする（g 重の縮退）。一般に、（1次あるいは高次の）摂動は縮退を解き、すべて異なるエネルギーを持つ g 個の摂動を受けた固有ケット $\{|l\rangle\}$ が生じる。λ がゼロに近づくとき $|l\rangle \to |l^{(0)}\rangle$ となり、それぞれの0次の「正しい」固有ケット $|l^{(0)}\rangle$

は H_0 の固有ケットですべて同じエネルギー E_D を持つ。二つの非摂動固有ケットの組 $\{|l^{(0)}\rangle\}$ と $\{|m^{(0)}\rangle\}$ は同じ縮退した部分空間 D を張るが、$\{|l^{(0)}\rangle\}$ は $\{|m^{(0)}\rangle\}$ と一致する必要はない。そこで、$\{|l^{(0)}\rangle\}$ は $\{|m^{(0)}\rangle\}$ と、部分空間内での変換

$$|l^{(0)}\rangle = \sum_{m\in D}^{g} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle |m^{(0)}\rangle \tag{2}$$

で結ばれている。この和は、縮退した部分空間内のエネルギー固有ケットに対してとる。

摂動を受けたケット $|l\rangle$ に対する **シュレーディンガー方程式** は、

$$(E_D^{(0)} - H_0)|l\rangle = (\lambda V - \Delta_l)|l\rangle$$

である。この方程式に $|l\rangle$ と Δ_l をパラメータ λ について

$$\begin{aligned} |l\rangle &= |l^{(0)}\rangle + \lambda|l^{(1)}\rangle + \cdots \\ \Delta_l &= \lambda\Delta_l^{(1)} + \lambda^2\Delta_l^{(2)} + \cdots \end{aligned}$$

と展開して代入する。λ のそれぞれのべきの係数を比較すると、方程式の組

$$\begin{aligned} (E_D^{(0)} - H_0)|l^{(0)}\rangle &= 0 && (3) \\ (E_D^{(0)} - H_0)|l^{(1)}\rangle &= (V - \Delta^{(1)})|l^{(0)}\rangle && (4) \\ (E_D^{(0)} - H_0)|l^{(2)}\rangle &= (V - \Delta^{(1)})|l^{(1)}\rangle - \Delta^{(2)}|l^{(0)}\rangle && (5) \\ &\vdots \end{aligned}$$

を得る。

λ^0 の次数では、単につまらない恒等式（3）$0 = 0$ が得られる。$\langle m'^{(0)}|$ を $\{\langle m^{(0)}|\}$ の組から取って、λ^1 の次数で得られる式（4）に左から掛ける。さらに、$|l^{(0)}\rangle$ に式（2）を代入すれば、

$$\sum_m V_{m'm}\langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle = \Delta_l^{(0)}\langle m'^{(0)}|l^{(0)}\rangle$$

あるいは、行列表示で

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots \\ V_{21} & V_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \Delta_l^{(1)} \begin{pmatrix} \langle 1^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \langle 2^{(0)}|l^{(0)}\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

を得る。これは、演算子 V の固有ベクトルと固有値を求める問題と見なせる。固有値は、固有方程式

$$\det(V - \Delta^{(1)}\mathbf{I}) = 0$$

の g 個の根として与えられる。

この固有値が縮退していなければ（全ての固有値が異なれば）、この固有値固有ベクトル問題を解くことにより、1 次のエネルギーのズレ $\Delta_l^{(1)}$ と「正しい」ゼロ次の固有ケットが一挙に得られる。この場合には、教科書で展開した縮退のある場合の摂動論が 2 次以上の摂動についてもそのまま使える。

この固有値がまだ縮退している場合には、縮退が解けるまでさらに高次の摂動を考慮して、「正しい」0 次のケットを決める必要がある。簡単のため、縮退が 1 次の摂動ではまったく解けず、2 次の摂動ですべて解ける場合を考えよう。

2 次の摂動を考える前に、1 次のケット $|l^{(1)}\rangle$ を非摂動ケットをつかって表しておこう。教科書 (5.2.12-13) 式より

$$|l^{(1)}\rangle = \frac{\phi_D}{E_D^{(0)} - H_0} V |l^{(0)}\rangle = \sum_{k \notin D} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl}}{E_D^{(0)} - E_k} = \sum_{m \in D} \sum_{k \notin D} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{km}}{E_D^{(0)} - E_k} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle \tag{6}$$

となる。

一次のエネルギーずれ $\Delta_l^{(1)}$ は、縮退している空間内のケットに対して全て共通なので、$E_D^{(0)} \to E_D^{(0)} + \Delta_l^{(1)}$ と置けば、$\Delta_l^{(1)} = 0$ としても一般性を失わない。そこで、式 (5) に左から $\langle m'^{(0)}|$ を掛けて、$|l^{(1)}\rangle$ に式 (6) を代入すれば、2 次のエネルギーのずれと「正しい」0 次のケットに関する方程式

$$\sum_{m \in D} \sum_{k \notin D} \frac{V_{m'k} V_{km}}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}} \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle = \Delta_l^{(2)} \langle m'^{(0)} | l^{(0)} \rangle \tag{7}$$

を得る。この固有値が縮退していなければ（全ての固有値が異なれば）、この固有値固有ベクトル問題を解くことにより、2 次のエネルギーのズレ $\Delta_l^{(2)}$ と「正しい」ゼロ次の固有ケットが一挙に得られる。あとは、教科書で展開した縮退のある場合の摂動論がそのまま使える。

本問の場合には、式 (7) の固有方程式は、

$$\begin{vmatrix} \dfrac{|\langle\alpha|V|\gamma\rangle|^2}{E_1 - E_2} - \Delta^{(2)} & \dfrac{\langle\alpha|V|\gamma\rangle\langle\gamma|V|\beta\rangle}{E_1 - E_2} \\ \dfrac{\langle\beta|V|\gamma\rangle\langle\gamma|V|\alpha\rangle}{E_1 - E_2} & \dfrac{|\langle\beta|V|\gamma\rangle|^2}{E_1 - E_2} - \Delta^{(2)} \end{vmatrix} = 0$$

となるので、

$$\begin{aligned}\Delta_1^{(2)} &= 0 \\ \Delta_2^{(2)} &= -\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1}\end{aligned}$$

を得る。$|\gamma\rangle$ に対しては縮退のない場合の摂動論が使えるので、結局

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= E_1 \\ \epsilon_2 &= E_1-\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1} \\ \epsilon_3 &= E_2+\frac{|a|^2+|b|^2}{E_2-E_1}\end{aligned}$$

となって、式 (1) と一致する。

【Q & A】

Q： **原子単位系** とは何か？

A：原子分子の世界の物理現象を記述するための単位系である。素電荷 e、電子の静止質量 m_e、ディラック定数 $\hbar$ をすべて 1 とおく。単位の名称としては「原子単位」あるいは「(a.u.)」（atomic units の略）を使う。たとえば、水素原子の半径 a_0、基底状態の束縛エネルギー E_R は、

$$\begin{aligned}a_0 &= \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 1(\text{a.u.}) = 0.529(\text{Å}) = 5.29\times10^{-11}(\text{m}) \\ E_R &= \frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = 0.5(\text{a.u.}) = 13.6(\text{eV}) = 2.18\times10^{-18}(\text{J})\end{aligned}$$

となる。このように原子単位系を使えば、原子レベルの現象にかんする物理量が 1 に近い数であらわせるので大変便利である。原子単位系のほか、長さの単位としてオングストローム $1(\text{Å}) = 10^{-10}(\text{m})$、エネルギーの単位としてエレクトロン・ボルト（電子が電位差 1 ボルトの 2 点間で加速されるエネルギー）$1(\text{eV}) = 1.60\times10^{-19}(\text{J})$ などもよく使われる。このほか、相対論的量子力学ではディラック定数 $\hbar$ と光速 c を 1 においた「自然単位系」も使われる。

問１３　水素の $2S_{1/2}$ 準位と $2P_{1/2}$ 準位に対して **シュタルク効果** を計算せよ。電場 ϵ は十分に弱く $e\epsilon a_0$ は **微細構造** と較べて小さいとするが、**ラムシフト** $\delta(\delta = 1057\mathrm{MHz})$ は考慮する。（すなわち、この計算で $2P_{3/2}$ を無視する。）$e\epsilon a_0 \ll \delta$ のときエネルギー変化は ϵ の２次であり、一方 $e\epsilon a_0 \gg \delta$ のときは ϵ の１次であることを示せ。（必要な動径積分は $\langle 2s|r|2p\rangle = 3\sqrt{3}a_0$ である。）この問題に関して **時間反転** の結果が現れていれば述べよ。この問題は Gottfried 1966, 問題 7-3 から転用した。

［解答］（スピン軌道相互作用などの）相対論的効果を考えない非相対論的量子力学によれば水素原子の $n = 2$ の状態は６重に縮退している。このうち相対論的補正を考慮した時点で縮退しているのは、$|2S_{1/2}(m = \pm\frac{1}{2})\rangle$、$|2P_{1/2}(m = \pm\frac{1}{2})\rangle$ の４つの状態である。これらの状態は、演算子 $\boldsymbol{J}^2$、J_z、$\boldsymbol{L}^2$、$\boldsymbol{S}^2$ の固有状態になっている。（たとえば、ランダウ・リフシッツ「相対論的量子力学Ｉ」§３４をみよ。）

この４つの状態を、２成分形のスピン角関数

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_l^{j=l\pm1/2,m} &= \pm\sqrt{\frac{l\pm m+1/2}{2l+1}}Y_l^{m-1/2}(\theta,\phi)\chi_+ \\ &\quad +\sqrt{\frac{l\mp m+1/2}{2l+1}}Y_l^{m+1/2}(\theta,\phi)\chi_-\end{aligned}$$

を使って表せば、

$$\begin{aligned}|2S_{1/2}(m=+1/2)\rangle &= R_{20}Y_0^0\chi_+ \\ |2S_{1/2}(m=-1/2)\rangle &= R_{20}Y_0^0\chi_- \\ |2P_{1/2}(m=+1/2)\rangle &= R_{21}\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}Y_1^0\chi_+ + \sqrt{\frac{2}{3}}Y_1^1\chi_-\right) \\ |2P_{1/2}(m=-1/2)\rangle &= R_{21}\left(-\sqrt{\frac{2}{3}}Y_1^{-1}\chi_+ + \sqrt{\frac{1}{3}}Y_1^0\chi_-\right)\end{aligned}$$

となる。これらの状態を基底とする部分空間で考えれば、摂動ポテンシャルのゼロでない行列要素は、

$$\langle 2S_{1/2}(m=\pm1/2)|e\epsilon z|2P_{1/2}(m=\pm1/2)\rangle = \mp\sqrt{3}e\epsilon a_0$$

である。（符号 $\mp$ は摂動ポテンシャルの時間反転対称性による。）ラムシ

フト δ を考慮すれば、摂動ハミルトニアンは

$$H \doteq \begin{pmatrix} \delta & 0 & -\sqrt{3}e\epsilon a_0 & 0 \\ 0 & \delta & 0 & \sqrt{3}e\epsilon a_0 \\ -\sqrt{3}e\epsilon a_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3}e\epsilon a_0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。固有方程式

$$\left[E^2 - \delta E - (\sqrt{3}e\epsilon a_0)^2\right]^2 = 0$$

より、固有エネルギー

$$E = \frac{\delta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\delta}{2}\right)^2 + (\sqrt{3}e\epsilon a_0)^2}$$

を得る。（それぞれ 2 重に縮退している）これから、
$\delta \gg a_0 e\epsilon$ のとき

$$\begin{aligned} E &= \frac{\delta}{2} \pm \frac{\delta}{2}\sqrt{1 + \left(\frac{2\sqrt{3}e\epsilon a_0}{\delta}\right)^2} \\ &\approx \frac{\delta}{2} \pm \frac{\delta}{2}\left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{2\sqrt{3}e\epsilon a_0}{\delta}\right)^2\right] \\ &\approx \delta + \frac{(\sqrt{3}e\epsilon a_0)^2}{\delta}, \quad -\frac{(\sqrt{3}e\epsilon a_0)^2}{\delta} \end{aligned}$$

となり、エネルギー変化は ϵ の 2 次である。
$\delta \ll a_0 e\epsilon$ のとき

$$\begin{aligned} E &= \frac{\delta}{2} \pm (\sqrt{3}e\epsilon a_0)\sqrt{1 + \left(\frac{\delta}{2\sqrt{3}e\epsilon a_0}\right)^2} \\ &\approx \frac{\delta}{2} \pm \sqrt{3}e\epsilon a_0 \end{aligned}$$

となり、エネルギー変化は ϵ の 1 次である。

摂動ハミルトニアンが時間反転不変であり全角運動量が $j = 1/2$ なので、クラマースの縮退が起こって各エネルギー状態は 2 重に縮退している。

問１４　水素原子の $n = 3$ の準位に対して、有限な解を与える最低次で **シュタルク効果** を計算せよ。 **スピン-軌道相互作用** や相対論的補正（ **ラムシフト** ）は無視して、有限な値になる最低次のエネルギー変化の他に、対応するゼロ次の固有ケットも求めよ。

［解答］

水素原子の $n = 3$ の準位に対しては、$3s$ という $l = 0$ の状態が１つと、$3p$ という $l = 1 (m = 0, \pm 1)$ の状態３つと、$3d$ という $l = 2$ $(m = 0, \pm 1, \pm 2)$ の状態が５つあり、すべて同一のエネルギー $(-e^2/18a_0)$ をもっている。よって、縮退のある摂動論が適用できる。一様な電場を z 方向にかけたとき、この摂動演算子は

$$V = -ezE_z = -eE_z T_1^{(0)}$$

で１階の磁気量子数０の **球面テンソル** で表される。よって、 **m 選択則** より行列要素は m が等しい状態間でのみ０でない。また、z はパリティが奇なのでパリティの異なる状態間でのみ行列要素が０でない。（$l = 0$ と $l = 1$、$l = 1$ と $l = 2$）よって０でない行列要素 $\langle 3l'm'|V|3lm\rangle$ は

$$\begin{aligned}
a &= \langle 3,1,0|V|3,0,0\rangle = \langle 3,0,0|V|3,1,0\rangle \\
b &= \langle 3,2,0|V|3,1,0\rangle = \langle 3,1,0|V|3,2,0\rangle \\
c &= \langle 3,2,1|V|3,1,1\rangle = \langle 3,1,1|V|3,2,1\rangle \\
&= \langle 3,2,-1|V|3,1,-1\rangle = \langle 3,1,-1|V|3,2,-1\rangle
\end{aligned}$$

である。最後の行の等号は、 **球面調和関数** の性質 $Y_l^{m*} = (-1)^m Y_l^{-m}$ による。 **m選択則** のために、摂動ポテンシャルの行列は次のようにブロック化されるので、各ブロックごとに対角化すれば良い。つまり、 m の値が等しい状態のみが混ざり合う。

$$\begin{matrix}
3sm = 0 \\ 3pm = 0 \\ 3dm = 0 \\ 3pm = +1 \\ 3dm = +1 \\ 3pm = -1 \\ 3dm = -1
\end{matrix}
\begin{bmatrix}
0 & a & 0 & & & & \\
a & 0 & b & & & & \\
0 & b & 0 & & & & \\
 & & & 0 & c & & \\
 & & & c & 0 & & \\
 & & & & & 0 & c \\
 & & & & & c & 0
\end{bmatrix}$$

固有方程式

$$(-\lambda^3 + (a^2+b^2)\lambda)(\lambda^2 - c^2)(\lambda^2 - c^2)\lambda^2 = 0$$

より、最低次のエネルギー変化は

$$\begin{cases} \lambda = 0, \pm\sqrt{a^2+b^2} & m=0\text{のブロック} \\ \lambda = \pm|c| & m=\pm1\text{のブロック} \\ \lambda = 0 & m=\pm2\text{のブロック} \end{cases}$$

となる。ここで、実際の波動関数を用いて行列要素を計算すると

$$\begin{aligned} a &= 3\sqrt{6}a_0eE_z \\ b &= 3\sqrt{3}a_0eE_z \\ c &= \frac{9}{2}a_0eE_z \end{aligned}$$

であるから、$\sqrt{a^2+b^2} = 9a_0eE_z, |c| = (9/2)a_0eE_z$ となって、エネルギー準位は等間隔に分裂することが分かる。

対応するゼロ次の固有ケットは

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2a^2+2b^2}}\Big(a|3sm=0\rangle + \sqrt{a^2+b^2}|3pm=0\rangle + b|3dm=0\rangle\Big) \\ |\beta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}}(b|3sm=0\rangle - a|3dm=0\rangle) \\ |\gamma\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2a^2+2b^2}}\Big(a|3sm=0\rangle - \sqrt{a^2+b^2}|3pm=0\rangle + b|3dm=0\rangle\Big) \\ |\delta\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|3pm=\pm1\rangle + |3dm=\pm1\rangle) \\ |\epsilon\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|3pm=\pm1\rangle - |3dm=\pm1\rangle) \end{aligned}$$

$\Delta E = +9a_0eE_z$	————	$\|\alpha\rangle$
$\Delta E = +\frac{9}{2}a_0eE_z$	————	$\|\delta\rangle$
$\Delta E = 0$	————	$\|\beta\rangle, \|3dm=\pm2\rangle$
$\Delta E = -\frac{9}{2}a_0eE_z$	————	$\|\epsilon\rangle$
$\Delta E = -9a_0eE_z$	————	$\|\gamma\rangle$

図 5.2: 水素原子（$n=3$）のシュタルク効果

問１５　電子が **スピン磁気モーメント** に類似な、非常に小さな固有の電気双極子モーメント（すなわち $\boldsymbol{\sigma}$ に比例している $\boldsymbol{\mu}_{el}$）を持っていると仮定しよう。**仮想的な相互作用** $-\boldsymbol{\mu}_{el}\cdot\boldsymbol{E}$ を弱い摂動として扱い、外部電磁場がないとき Na 原子（$Z=11$）のエネルギー準位がどのように変化するか、定性的に議論せよ。準位のずれは１次か２次か。どの状態が互いに混合するか、具体的に述べよ。摂動の影響を受ける最低準位のエネルギー変化に対する表式を求めよ。この問題全体を通じて、価電子だけが仮想的な相互作用を受けていると仮定せよ。

［解答］価電子が原子核や他の電子から受ける中心力を $V_c(r)$ と表すと、仮想的な相互作用による摂動ポテンシャルは

$$V=-\boldsymbol{\mu}_{el}\cdot\boldsymbol{E}=-\frac{\mu_{el}}{e}\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}}{r}\frac{dV_c(r)}{dr}$$

となり、**擬スカラー演算子** となる。よって、行列要素 $\langle n'l'j'm'|V|nljm\rangle$ は、**回転対称性** より、$j'=j, m'=m$ のときのみゼロでない。また、**空間反転対称性** より $l'-l=$ 奇数 のときのみゼロでない。以上の条件より、価電子の状態が $|3S_{1/2}m=\pm1/2\rangle$ であることを考慮すると、摂動ポテンシャル V は、$|3S_{1/2}m=\pm1/2\rangle$ と $|3P_{1/2}m=\pm1/2\rangle$（複号同順）を互いに混合する。

摂動ポテンシャル V の行列要素を

$$\langle 3S_{1/2}m=\pm1/2|V|3P_{1/2}m=\pm1/2\rangle=\mu_{el}\epsilon$$

と置けば、摂動ポテンシャル V の行列表示は

$$V\doteq\begin{pmatrix}0 & \mu_{el}\epsilon\\ \mu_{el}\epsilon & 0\end{pmatrix}$$

となるので、一次のエネルギー変化は０である。また $3S_{1/2}$ に対する２次のエネルギー変化は

$$\Delta^{(2)}_{3S_{1/2}}=\frac{\mu_{el}^2\epsilon^2}{E_{3S_{1/2}}-E_{3P_{1/2}}}<0$$

状態ケットは、

$$|3S_{1/2}m=\pm1/2\rangle+|3P_{1/2}m=\pm1/2\rangle\frac{\mu_{el}\epsilon}{E_{3S_{1/2}}-E_{3P_{1/2}}}$$

となり、エネルギーが下がる。この状態は、原子核と他の電子の作る電場 $\boldsymbol{E}$ の中を、エネルギーが低くなるように電気双極子が向きを変えながら回転している状態を表している。

問16　**球対称ポテンシャル** $V(r)$ によりある固定した中心に **束縛** されている粒子を考える。

a. 基底状態にせよ励起状態にせよ、すべての s- 状態に対して

$$|\phi(0)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle$$

であることを証明せよ。

b. この関係式を、 **3次元等方調和振動子** や **水素原子** などの **基底状態** に対して確かめよ。（ノート：この関係式は、 **クォーク** と反クォークの間のポテンシャルの形を推測するのに実際に有効であることが分かっている。）

［解答］

a. 球対称ポテンシャル $V(r)$ によりある固定した中心に束縛されている s 状態（$l=0$）粒子の波動関数は、動径方向のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR(r)) + V(r)R(r) = ER(r) \tag{1}$$

を満たし、つぎのような性質をもつ。

$$\begin{aligned}\lim_{r\to 0} R(r) &= const \\ \lim_{r\to\infty} R(r) &= 0\end{aligned}$$

ポテンシャルが $\lim_{r\to\infty} r^2V(r) = 0$ を満たすとすると、部分積分により

$$\begin{aligned}\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle &= \int_0^\infty r^2dr[R(r)]^2\frac{dV}{dr} \\ &= [r^2V(r)[R(r)]^2]_0^\infty - \int_0^\infty dr\frac{d(rR)}{dr}2rR(r)V(r) \\ &= -\int_0^\infty dr\frac{d(rR)}{dr}2r\left(ER(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2(rR)}{dr^2}\right) \\ &= -E\int_0^\infty dr\frac{d(rR)^2}{dr} - \frac{\hbar^2}{m}\int_0^\infty dr\frac{d(rR)}{dr}\frac{d^2(rR)}{dr^2}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= -E\left[(rR(r))^2\right]_0^\infty - \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{d(rR)}{dr}\right)^2\right]_0^\infty \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(R(r) + r\frac{dR}{dr}\right)^2\right]_0^\infty = \frac{\hbar^2}{2m}[R(r=0)]^2
\end{aligned}
$$

ただし、2行目から3行目に移るときに動径方向のシュレーディンガー方程式、式（1）を代入した。極座標による s 状態の波動関数が球面調和関数を使って

$$
\phi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R(r)
$$

と書かれるので

$$
|\phi(0)|^2 = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle
$$

を得る。

b. (1) 3次元等方調和振動子の基底状態について、

$$
V = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2, \quad \phi(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4}\exp\left(-\frac{r^2}{\frac{2\hbar}{m\omega}}\right)
$$

より

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/2} 4\pi\int_0^\infty r^2 dr \exp\left(-\frac{r^2}{\frac{\hbar}{m\omega}}\right) \times m\omega^2 r \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/2} = |\phi(0)|^2
\end{aligned}
$$

が成り立つ。

(2) 水素原子の基底状態について、

$$
V(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad \phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}
$$

より

$$
\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\frac{1}{\pi a_0^3}4\pi\int_0^\infty r^2 dr e^{-2r/a_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{1}{\pi a_0^3} = |\phi(0)|^2
$$

が成り立つ。

問１７
a. 回転軸と垂直方向の磁場中にある **剛体回転子** のハミルトニアンが、磁場の２次の項を無視して

$$A\boldsymbol{L}^{2} + BL_z + CL_y$$

の形であるとする（Merzbacher 1970,）。$B \gg C$ として摂動論を用い、エネルギー固有値の近似値を有限な解を与える最低次で求めよ。

b. 一電子原子（例えばアルカリ原子）の行列要素

$$\langle n'l'm_l'm_s'|(3z^2 - r^2)|nlm_lm_s\rangle, \quad \langle n'l'm_l'm_s'|xy|nlm_lm_s\rangle$$

を考える。Δl、Δm_l および Δm_s の **選択則** を表せ。答が正しいことを示せ。

［解答］

a. ハミルトニアンを非摂動ハミルトニアン H_0 と摂動ハミルトニアン V に分ける。

$$\begin{aligned} H_0 &= A\boldsymbol{L}^{2} + BL_z \\ V &= CL_y \end{aligned}$$

そして、H_0 の固有ケット $|l,m\rangle$ を非摂動ケットとする。１次の摂動のエネルギー変化は

$$\langle l,m|CL_y|l,m\rangle = \langle l,m|\frac{C}{2i}(L_+ - L_-)|l,m\rangle = 0$$

であるから、２次の摂動が必要である。非摂動のエネルギー固有値と摂動ハミルトニアンの行列要素は

$$\begin{aligned} E_{lm}^{(0)} &= A(l+1)l\hbar^2 + Bm\hbar \\ \langle l',m'|V|l,m\rangle &= \frac{C}{2i}\langle l',m'|L_+ - L_-|l,m\rangle \\ &= \frac{C\hbar}{2i}\Big(\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\delta_{m',m+1}\delta_{l'l} \\ &\quad -\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\delta_{m',m-1}\delta_{l'l}\Big) \end{aligned}$$

であるから、2次のエネルギー変化は

$$\begin{aligned}\Delta_{lm}^{(2)} &= \sum_{(l',m')\neq(l,m)} \frac{|V_{(l'm')(lm)}|^2}{E_{lm}^{(0)} - E_{l'm'}^{(0)}} \\ &= \frac{C^2\hbar(l-m)(l+m+1)}{-4B} + \frac{C^2\hbar(l+m)(l-m+1)}{4B} \\ &= \frac{C^2 m\hbar}{2B}\end{aligned}$$

となる。

b. 3章の問28より、

$$3z^2 - r^2 = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} r^2 Y_2^0(\theta,\phi) \tag{1}$$

$$xy = -ir^2\sqrt{\frac{2\pi}{15}}(Y_2^{+2} - Y_2^{-2}) \tag{2}$$

となるので、

スピン量子数 行列要素はスピン演算子を含まないので $\boxed{\Delta m_s = 0}$ である。

磁気量子数 m **選択則** より (1) の行列要素に対して $\boxed{\Delta m_l = 0}$、(2) に対して $\boxed{\Delta m_l = \pm 2}$ である。

方位量子数 テンソル演算子の行列要素 $\langle j', m'|T_q^{(k)}|j, m\rangle$ がゼロにならないための三角関係式 $|j-k| \le j' \le j+k$ より、$\Delta l = 0, \pm1, \pm2$ となる。また、$Y_2^{0,\pm2}$ はパリティが偶なので、**パリティ選択則** により同じパリティの状態同士を結び付ける。よって、Δl = **偶数** でなければならない。結局、$\boxed{\Delta l = 0, \pm 2}$ となる。

	Δl	Δm_l	Δm_s
$3z^2 - r^2$	$0, \pm2$	0	0
xy	$0, \pm2$	±2	0

表 5.1: Δl、Δm_l および Δm_s の選択則

問１８　**基底状態** にある **水素原子** $[\langle \boldsymbol{x}\,|0\rangle = (1/\sqrt{\pi a_0^3})e^{-r/a0}]$ に対して、ハミルトニアンの中でふつう無視している $e\boldsymbol{A}^{\,2}/2m_e c^2$ の項を１次摂動で取入れ、 **２次のゼーマン効果** を計算せよ。エネルギー変化を

$$\Delta = -\frac{1}{2}\chi \boldsymbol{B}^{\,2}$$

と表し、 **反磁性帯磁率** χ の表式を求めよ。（次の定積分

$$\int_0^\infty e^{-ar} r^n dr = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

が役立つだろう。）

［解答］ $\boldsymbol{A} = (-yB/2, xB/2, 0)$ とおけば、

$$\frac{e^2\boldsymbol{A}^{\,2}}{2mc^2} = \frac{e^2}{8mc^2}|\boldsymbol{B}\,|^2 r^2 \sin^2\theta$$

と書けるので、一次のエネルギー変化は

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{e^2}{8mc^2}|\boldsymbol{B}\,|^2\langle 0|r^2\sin^2\theta|0\rangle \\ &= \frac{e^2 a_0^2}{4mc^2}|\boldsymbol{B}\,|^2\end{aligned}$$

となる。よって

$$\chi = -\frac{e^2 a_0^2}{2mc^2} \times N_A(cm^3/mol)$$

となる。ただし、$N_A = 6.025 \times 10^{23}(mol^{-1})$ は **アボガドロ定数** である。第２章問３５も参照せよ。

問１９ (Merzbacher 1970, p.448, 問題１１) **ヘリウム** の波動関数として **変分法** で求められた

$$\phi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = \frac{Z_{eff}^3}{\pi a_0^3} \exp\left[\frac{-Z_{eff}(r_1 + r_2)}{a_0}\right]$$

$Z_{eff} = 2 - 5/16$ を用いよ。［訳注：(6.4.13)-(6.4.15) 参照］ **反磁性帯磁率** の測定値は、 $-1.88 \times 10^{-6}(\mathrm{cm}^3/\mathrm{mol})$ である。原子がベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}$ で表される一様な磁場中にあるとして、磁場中の原子内電子を表すハミルトニアンを用い、角運動量がゼロの状態におけるエネルギー変化を、B^2 のオーダーで定めよ。原子の反磁性帯磁率 χ を $E = -\frac{1}{2}\chi B^2$ で定義して、 **基底状態** にあるヘリウム原子の χ を計算し測定値の結果と比較せよ。

［解答］

問１８の結果を $a_0 \to a_0/Z_{eff}$ という置き換えをすることで、利用すると、エネルギー変化 Δ は

$$\begin{aligned}
\Delta &= \frac{e^2}{8mc^2}|\boldsymbol{B}|^3\langle\phi|r_1^2\sin^2\theta + r_2^2\sin^2\theta|\phi\rangle \\
&= \frac{2}{(Z_{eff}^2)}\frac{e^2 a_0^2}{4mc^2}
\end{aligned}$$

となる。よって、反磁性帯磁率

$$\begin{aligned}
\chi &= -\frac{2}{(Z_{eff}^2)}\frac{e^2 a_0^2}{2mc^2} \times N_A \\
&= -1.67 \times 10^{-6}(cm^3/mol)
\end{aligned}$$

を得る。ただし、 $N_A = 6.025 \times 10^{23}(mol^{-1})$ は **アボガドロ定数** である。

問２０　１次元 調和振動子 の 基底状態 のエネルギーを、β をパラメータとした試行関数

$$\langle x|\tilde{0}\rangle = e^{-\beta|x|}, \quad (\beta > 0)$$

を用いて算出せよ。

$$\left(\int_0^\infty e^{-ax}x^n = n!/a^{n+1}\text{を使うとよい。}\right)$$

［解答］

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ \langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle &= 2\int_0^\infty dx e^{-2\beta x} = \frac{1}{\beta} \end{aligned}$$

であるから、

$$\begin{aligned} \frac{d|x|}{dx} &= 2\theta(x) - 1 \\ \frac{d\theta(x)}{dx} &= \delta(x) \\ \frac{d}{dx}e^{-\beta|x|} &= -\beta(2\theta(x)-1)e^{-\beta|x|} \\ \frac{d^2}{dx^2}e^{-\beta|x|} &= -2\beta\delta(x)e^{-\beta|x|} + \beta^2 e^{-\beta|x|} \end{aligned}$$

などの等式を使って、エネルギー期待値 $\overline{H}$ は

$$\overline{H} = \frac{\langle\tilde{0}|H|\tilde{0}\rangle}{\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle} = \frac{\hbar^2\beta^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{4\beta^2}$$

となる。最小のエネルギー期待値を与える β は、

$$\frac{\partial\overline{H}}{\partial\beta} = \frac{\hbar^2\beta}{m} - \frac{m\omega^2}{2\beta^3} = 0$$

より、

$$\beta^2 = \frac{m\omega}{\sqrt{2}\hbar}$$

となる。したがって、基底状態のエネルギー

$$\overline{H}_{min} = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2}} = 0.707\hbar\omega$$

を得る。この変分法による基底状態のエネルギーは、正確な値 $0.5\hbar\omega$ よりいくらか大きめの値になっている。（誤差 41 %）

問２１　微分方程式

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + (\lambda - |x|)\phi = 0, |x| \to \infty \text{にたいして} \phi \to 0$$

の最低固有値 (λ) を、試行関数として

$$\phi = \begin{cases} c(a - |x|), & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \quad (a\text{は変分パラメータ})$$

を用いた **変分法** により算出せよ。（注意：$d\phi/dx$ は $x = 0$ で不連続である。）この問題を解くのに以下の数値のデータが役立つであろう。$3^{1/3} = 1.442, 5^{1/3} = 1.710, 3^{2/3} = 2.080, \pi^{2/3} = 2.145$. なお最低固有値の 厳密な 値は 1.019 であることが示せる。

［解答］　問の試行関数より

$$\langle\phi|\phi\rangle = 2c^2\int_0^a (a-x)^2 dx = \frac{2}{3}c^2 a^3$$

となる。また、

$$\begin{aligned} \phi(x) &= c(a - |x|)\theta(a - |x|) \\ \frac{d}{dx}\phi(x) &= c(1 - 2\theta(x))\theta(a - |x|) \\ \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) &= -2c\delta(x) + c\delta(a - |x|) \end{aligned}$$

などの式を使うことにより、

$$\begin{aligned} \langle\phi|H|\phi\rangle &= \langle\phi| - \frac{d^2}{dx^2} + |x||\phi\rangle \\ &= 2ac^2 + \frac{1}{6}a^4c^2 \end{aligned}$$

となるので、エネルギー期待値

$$\overline{H} = \frac{\langle\phi|H|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = \frac{12 + a^3}{4a^2}$$

を得る。

最小のエネルギーを与える a および最小のエネルギー $\overline{H}_{min}$ は $\dfrac{\partial\overline{H}}{\partial a} = 0$ より、$\overline{H}_{min} = \dfrac{9}{4\cdot 3^{2/3}} = 1.082$ となる。（誤差 6.1 %）

問２２　古典的角振動数が ω_0 である１次元 **調和振動子** を考える。この系は $t<0$ で基底状態にあることが分かっている。$t>0$ では **時間依存性のあるポテンシャル**

$$V(t)=F_0 x\cos\omega t$$

が加わる。ここで F_0 は空間的にも時間的にも一定値である。時間を含む摂動論を用い有限な解を与える最低次で期待値 $\langle x\rangle$ の表式を時間の関数として求めよ。この手続きは $\omega\approx\omega_0$ のときも有効か。
［$\langle n'|x|n\rangle=\sqrt{\hbar/2m\omega_0}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}+\sqrt{n}\delta_{n',n-1})$ を用いるとよい。］

［解答］　時間に依存した１次の摂動論を用いる。添え字 I で相互作用表示であることを示せば、$U_I(t)$ の展開式 (5.6.17) より

$$\begin{aligned}
c_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar}\int_0^t dt' e^{in\omega_0 t'}V_{n0}(t') \\
&= \frac{-i}{\hbar}\int_0^t dt' e^{in\omega_0 t'}(e^{+i\omega t'}+e^{-i\omega t'})\times\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\frac{F_0}{2}\delta_{n,1} \\
&= -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\frac{F_0}{2}\delta_{n,1}\left(\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{\hbar\omega_0+\hbar\omega}+\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\hbar\omega_0-\hbar\omega}\right) \\
|t\rangle_I &= |0\rangle+c_1^{(1)}(t)|1\rangle
\end{aligned}$$

となる。したがって、位置の期待値は

$$\begin{aligned}
{}_I\langle t|x_I|t\rangle_I &= {}_I\langle t|e^{iH_0t/\hbar}xe^{-iH_0t/\hbar}|t\rangle_I \\
&= \langle 0|x|0\rangle+|c_1(t)|^2\langle 1|x|1\rangle \\
&\quad +c_1(t)\langle 0|x|1\rangle e^{-i\omega_0 t}+c_1^*(t)\langle 1|x|0\rangle e^{+i\omega_0 t} \\
&= 2\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\mathrm{Re}\left\{c_1(t)e^{-i\omega_0 t}\right\} \\
&= \frac{-F_0}{m}\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2}(\cos\omega t-\cos\omega_0 t)
\end{aligned}$$

となる。

この手続きは $\omega\approx\omega_0$ のときには有効でない。問２５の解答からも分かるように、この問題の n 次の展開係数 $c_n^{(n)}$ は分母に $(\omega_0-\omega)^n$ を含むので $\omega_0\approx\omega$ の領域では高次の摂動項が重要になってくる。したがって、高次の摂動項を足し合わせる必要がある。このことは、古典的調和振動子が固有振動数に近い振動数の外力を受けると **共鳴** を起こして振幅がどんどん大きくなってゆくことに対応する。

問２３　１次元 **調和振動子** が、$t < 0$ で基底状態にあった。$0 \leq t$ でこの系に時間依存性はあるが空間的には一様な <u>力</u>（ポテンシャルではない）

$$F(t) = F_0 e^{-t/\tau}$$

が、ｘ方向にかかった。
a. 時間を含む１次の摂動論を用い、$t > 0$ で振動子が第１励起状態に見いだされる確率を求めよ。$t \to \infty$ （τ は有限）の極限で、この結果は時間に依らないことを示せ。これはもっともな結果か、意外な結果か。

b. これより高い励起状態に見いだされることはあるか。
［$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$ を用いるとよい。］

［解答］問２２で $\omega \to i/\tau$ と置き換えた問題に対応する。
a. 時間に依存した１次の摂動論を用いる。摂動ポテンシャルは

$$\begin{aligned} V(t) &= -F_0 x e^{-t/\tau} \\ V_{n0}(t) &= -F_0 e^{-t/\tau}\langle n|x|0\rangle \\ &= -F_0 e^{-t/\tau}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\delta_{n1} \end{aligned}$$

となるので、$U_I(t)$ の展開式 (5.6.17) より

$$\begin{aligned} c_1^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar}\int_0^t dt' e^{i\omega_0 t} V_{10}(t') \\ &= \frac{+i}{\hbar}F_0\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\int_0^t dt' e^{-(1/\tau - i\omega_0)t'} \\ &= \frac{+i}{\hbar}F_0\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\frac{-1}{1/\tau - i\omega_0}(e^{-(1/\tau - i\omega_0)t} - 1) \end{aligned}$$

となる。したがって、時刻 t に振動子が第一励起状態に見いだされる確率

$$\begin{aligned} P(t) &= |c_1^{(1)}(t)|^2 \\ &= \frac{F_0^2}{2m\hbar\omega_0}\frac{1}{1/\tau^2 + \omega_0^2}|e^{-(1/\tau - i\omega_0)t} - 1|^2 \\ &= \frac{F_0^2}{2m\hbar\omega_0}\frac{1}{1/\tau^2 + \omega_0^2}(e^{-2t/\tau} - 2e^{-t/\tau}\cos\omega_0 t + 1) \end{aligned}$$

を得る。

$t \gg \tau$ では、

$$|e^{-(1/\tau - i\omega_0)t} - 1|^2 \to 1$$

であるから、この確率は時間に依らず

$$P(t) = \frac{F_0^2}{2m\hbar\omega_0}\frac{1}{1/\tau^2 + \omega_0^2}$$

となる。$t \gg \tau$ では外力 F は急激に小さくなり、系に実質的に外力が加わっているのは $t \sim \tau$ までなので、$t \gg \tau$ で励起確率が時間によらないのはもっともである。

b. $c_{n\neq 1}^{(1)}(t) = 0$ なので、一次の摂動の範囲では $(n \geq 2)$ の高い励起状態は見いだされない。式 (5.6.17) より、2 次の摂動まで考えれば

$$c_{n=2}^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\omega_0 t_1} V_{21}(t_1) e^{i\omega_0 t_2} V_{10}(t_2) \neq 0$$

であり、$n = 2$ の励起状態も見いだされることが分かるが、その確率は小さい。一般に n 次の摂動まで考えれば第 n 励起状態が励起されることがわかるが、その確率は急激に小さくなる。

実際に、十分に長い時間たった後（$t \gg \tau$）に第 2 励起状態に系が見いだされる確率を求めてみよう。最低次（2 次）の時間に依存した摂動論を用いよう。

$$\begin{aligned}
V_{n,n-1}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\sqrt{n}F_0 e^{-t/\tau} \\
c_{n=2}^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{i\omega_0 t_1} V_{21}(t_1) e^{i\omega_0 t_2} V_{10}(t_2) \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}F_0\right)^2 \sqrt{2\cdot 1} \\
&\quad \times \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 e^{(-1/\tau + i\omega_0)t_1} e^{(-t/\tau + i\omega_0)t_2} \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}F_0\right)^2 \sqrt{2!} \\
&\quad \times \frac{1}{2!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 e^{(-1/\tau + i\omega_0)t_1} e^{(-t/\tau + i\omega_0)t_2} \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}F_0\right)^2 \frac{1}{\sqrt{2!}} \left(\frac{e^{(-1/\tau + i\omega_0)t} - 1}{-1/\tau + i\omega}\right)^2
\end{aligned}$$

$$c_{n=2}^{(2)}(t=\infty) \;=\; \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}F_0\right)^2 \frac{1}{\sqrt{2!}} \left(\frac{1}{1/\tau - i\omega}\right)^2$$

したがって、第 2 励起状態に見いだされる確率

$$P_2^{(2)}(t=\infty) = |c_2^{(2)}|^2 = \frac{1}{2!}\left(\frac{\frac{\hbar}{2m\omega_0}F_0^2}{(\hbar/\tau)^2 + (\hbar\omega_0)^2}\right)^2$$

を得る。

同様にして、十分に長い時間たった後（$t \gg \tau$）に第 n 励起状態に系が見いだされる確率を、最低次（n 次）の時間に依存した摂動論で求めると

$$c_n^{(n)}(t) \;=\; \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}F_0\right)^n \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{e^{(-1/\tau+i\omega_0)t} - 1}{-1/\tau + i\omega}\right)^n$$

$$P_n^{(n)}(t=\infty) \;=\; \frac{1}{n!}\left(\frac{\frac{\hbar}{2m\omega_0}F_0^2}{(\hbar/\tau)^2 + (\hbar\omega_0)^2}\right)^n$$

となり、摂動 F_0 が小さければ確率は n が大きくなるにつれて急激に小さくなることがわかる。

問２４　**調和振動子** のポテンシャルに **束縛** された粒子を考える。はじめ $(t<0)$ この粒子は基底状態にあった。$t=0$ で

$$H'(x,t) = Ax^2 e^{-t/\tau}$$

の形の摂動が加わった。時間を含む摂動論を用いて、十分に長い時間 $t \gg \tau$ がたったのち、系がある与えられた励起状態に遷移している確率を計算せよ。すべての終状態を考えよ。

［解答］

摂動ポテンシャル $V(t) = H'(x,t)$ は

$$\begin{aligned} V(t) &= Ax^2 e^{-t/\tau} \\ V_{nm}(t) &= Ae^{-t/\tau}\langle n|x^2|m\rangle \\ &= Ae^{-t/\tau}\frac{\hbar}{2m\omega}[\sqrt{m(m-1)}\delta_{n,m-2} + \\ &\quad \sqrt{n(n-1)}\delta_{n,m+2} + (2m+1)\delta_{n,m}) \end{aligned} \tag{1}$$

となる。第２章の問１３を参考にせよ。

摂動ポテンシャル $V(t)$ は、 **パリティ** が偶なので同じパリティを持った状態同士を結び付ける。したがって、はじめの状態がパリティが偶の基底状態なので、奇のパリティをもった状態（n が奇数）に対して $c_n^{(i)}(t) = 0$ となる。これは、摂動の１次に限らず高次の項まで正しい。

さて、式（1）より、$V(t)$ は量子数 n を最大２増加させるので第 n 励起状態（n は偶数）に遷移する 最低次の係数 は（$n/2$）次である。

$$V_{n,n-2} = \frac{\hbar A}{2m\omega}\sqrt{n(n-1)}e^{-t/\tau}$$

$$\begin{aligned} &c_n^{(n/2)}(t) \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^{n/2}\left(\frac{\hbar A}{2m\omega}\right)^{n/2}\sqrt{n!}\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}dt_2\cdots\int_0^{t_{n/2-1}}dt_{(n/2)} \times \\ &\quad e^{(-1/\tau+2i\omega)t_1}e^{(-1/\tau+2i\omega)t_2}\cdots e^{(-1/\tau+2i\omega)t_{n/2}} \\ &= \left(\frac{-iA}{2m\omega}\right)^{n/2}\sqrt{n!}\frac{1}{(n/2)!}\int_0^t dt_1\int_0^t dt_2\cdots\int_0^t dt_{(n/2)} \times \\ &\quad e^{(-1/\tau+2i\omega)t_1}e^{(-1/\tau+2i\omega)t_2}\cdots e^{(-1/\tau+2i\omega)t_{n/2}} \end{aligned}$$

$$= \left(\frac{-iA}{2m\omega}\right)^{n/2} \frac{\sqrt{n!}}{(n/2)!} \left(\frac{e^{(-1/\tau+2i\omega)t}-1}{-1/\tau+2i\omega}\right)^{n/2}$$

$$c_n^{(n/2)}(t=\infty) \;=\; \frac{\sqrt{n!}}{(n/2)!} \left(\frac{-iA}{2m\omega(1/\tau-2i\omega)}\right)^{n/2}$$

したがって、十分長い時間がたったのち第 n 励起状態に遷移している確率は、最低次まで計算して、

$$P_n(t=\infty) = \begin{cases} 0 & (n\text{が奇数}) \\ \dfrac{n!}{[(n/2)!]^2}\left(\dfrac{A^2}{4m^2\omega^2(1/\tau^2+4\omega^2)}\right)^{n/2} & (n\text{が偶数}) \end{cases}$$

となる。

【Q＆A】

Q：水素原子のハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

である。

（1）電子の動径方向の広がりを Δr として不確定性原理 $\Delta r \Delta p \approx \hbar$ を用いることにより、水素原子の基底状態の電子の広がりと束縛エネルギーを見積もれ。（エネルギーを Δr について変分せよ。）

（2）点電荷 Z のまわりに電子が一つ束縛されているときの基底状態の電子の広がりと束縛エネルギーを見積もり、電荷 Z にどのように依存するか議論せよ。

（3）もしも、ポテンシャルが $-\dfrac{e^2}{r}$ でなく、$-\dfrac{e^2}{r^2}$ だったら、水素原子はどうなるか。

問２５　二準位系の無摂動ハミルトニアンが

$$H_0 \doteq \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}$$

で表されている。これに時間に依存する摂動

$$V(t) \doteq \begin{pmatrix} 0 & \lambda\cos\omega t \\ \lambda\cos\omega t & 0 \end{pmatrix} \qquad (\lambda \text{ は実数})$$

が加わるとする。

a. $t = 0$ で系は $(1,0)$ で表される一番目の状態にあることが分かっている。時間を含む摂動論を用い、$E_1^0 - E_2^0$ が $\pm\hbar\omega$ に近くないことを仮定して、系が $(0,1)$ で表される２番目の状態に見いだされる確率の表式を、時間 $t(t>0)$ の関数として導け。

b. $E_1^0 - E_2^0$ が $\pm\hbar\omega$ に近いとき、この手続きはなぜ有効でないのか。

［解答］

a. 摂動ポテンシャルの行列要素が

$$V_{12}(t) = V_{21}(t) = \lambda\cos\omega t = \frac{\lambda}{2}(e^{+i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

であるから、$E_2^0 - E_1^0 = \hbar\omega_0$ とおけば

$$\begin{aligned}
c_2^{(1)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\frac{\lambda}{2}\int_0^t dt_1\; e^{i\omega_0 t_1}(e^{+i\omega t_1} + e^{-i\omega t_1}) \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\frac{\lambda}{2}\left(\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{i(\omega_0+\omega)} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{i(\omega_0-\omega)}\right) \\
P_2^{(1)}(t) &= |c_2^{(1)}(t)|^2 \\
&= \frac{\lambda^2}{4\hbar^2}\left[\left(\frac{\cos(\omega_0+\omega)t-1}{\omega_0+\omega} + \frac{\cos(\omega_0-\omega)t-1}{\omega_0-\omega}\right)^2\right. \\
&\qquad \left. + \left(\frac{\sin(\omega_0+\omega)t}{\omega_0+\omega} + \frac{\sin(\omega_0-\omega)t}{\omega_0-\omega}\right)^2\right]
\end{aligned}$$

b. 一般に $(2m+1)$ 次の係数はだいたい

$$c_2^{(2m+1)}(t) \sim \left(\frac{\lambda}{2\hbar(\omega_0 \pm \omega)}\right)^{2m+1}$$

の大きさを持つので、$|\hbar(\omega_0 \pm \omega)| \gg \lambda/2$ ならば最低次の摂動 $(n = 1)$ を考えればよい。しかし、$|\hbar(\omega_0 \pm \omega)| \approx \lambda/2$ のときは、高次の係数を加えなければならない。

【Q＆A】

Q：水素様原子の核の電荷が大きいとき核の近くで電子の速度は光速近くまで加速されるから相対性理論の効果があるのではないですか。

A：不確定性原理をつかって基底状態のエネルギーを概算してみよう。スピンを無視して相対性理論の効果を考慮すれば、電子のエネルギーは

$$E = -\frac{Ze^2}{r} + \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$$

である。電子の位置のゆらぎを Δr、運動量のゆらぎを Δp とすると、不確定性原理より $\Delta r \Delta p \approx \hbar$ の関係がある。したがって、

$$E = -\frac{Ze^2}{\Delta r} + \sqrt{m^2c^4 + \left(\frac{\hbar}{\Delta r}\right)^2 c^2}$$

とかける。ただし、微細構造定数 α を $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ とおいた。$1/\Delta r$ を変分パラメータとして基底状態のエネルギーをもとめると、

$$E_0 = mc^2\sqrt{1-(\alpha Z)^2}$$

となる。$Z \ll 137$ の非相対論的極限では、よく知られた結果

$$E_0 = mc^2 - \frac{Z^2me^4}{2\hbar^2}$$

になる。mc^2 は、電子の静止質量のエネルギーである。電荷を大きくして行くと、$Z > 137$ では原子の半径は $\Delta r \to 0$ となって潰れて、エネルギーが虚数になってしまう。じっさいは、原子核は点電荷ではなく有限の半径があるエネルギーは虚数にはならずに下がってゆく。エネルギーがディラックの海の海面 $-mc^2$ より低くなると、真空の崩壊がおこり $Z >$ 173 のイオンは安定に存在できない。すなわち、原子核は真空から電子を引きはがして吸い込んでしまう。電子が抜けたあとの真空の穴は、陽電子として放出される。このような現象を研究するために、重イオンどうしを加速して正面衝突させて瞬間的に巨大原子核をつくりだす実験がおこなわれている。[17,18]

問２６　角振動数 ω の１次元 調和振動子 に、空間的に一様であるが時間に依存する力（ポテンシャルで はない）

$$F(t) = \frac{F_0\tau/\omega}{\tau^2 + t^2}, \qquad -\infty < t < \infty$$

が作用している。$t = -\infty$ で振動子は基底状態にあったことが分かっている。時間を含む一次の摂動論を用い、$t = +\infty$ で振動子が第１励起状態に見いだされる確率を計算せよ。
上級者向問題：$F(t)$ は振動子に与えられる力積 $\int F(t)dt$ が常に一定であるように — つまり τ に依らないように — 規格化してある。しかし $\tau \gg 1/\omega$ とすると、励起する確率は実際上無視できる。これはもっともであろうか。［$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$ を用いるとよい。］

［解答］問２３と同様にして解くことができる。摂動ポテンシャル

$$\begin{aligned} V(t) &= -F_0 x \frac{\tau/\omega}{\tau^2 + t^2} \\ V_{10}(t) &= -F_0 \frac{\tau/\omega}{\tau^2 + t^2}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \end{aligned}$$

より、一次の摂動の係数は

$$\begin{aligned} c_1^{(1)}(t=\infty) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t} V_{10}(t) \\ &= \left(\frac{i}{\hbar}\right) F_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dt\ e^{i\omega t}\frac{\tau/\omega}{\tau^2 + t^2} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) F_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\pi}{\omega} e^{-\omega\tau} \end{aligned}$$

となるから、$t = +\infty$ で振動子が第一励起状態に見い出される確率は

$$P_1^{(1)}(t=\infty) = \frac{F_0^2\pi^2}{2m\hbar\omega^3} e^{-2\omega\tau}$$

となり、$\tau \gg 1/\omega$ のとき非常に小さくなる。

このことは、系に摂動がゆっくりとかかれば量子数は変化しないという 断熱定理 を考えればもっともである。詳しくは、朝永博士の教科書 [3] の第１章を見よ。粒子には、ゆっくり変化するポテンシャルは事実上止まってみえるので、波動関数はポテンシャルに完全に追随して各時点のポテンシャルの基底状態をとるのである。

また、摂動ポテンシャルを調和摂動の重ね合わせとして考えることもできる。$\tau \gg 1/\omega$ のときには、励起に必要な摂動ポテンシャルの ω 成分が非常に小さくなるので励起確率が小さくなると解釈できる。

問２７　時間に依存しないポテンシャルの影響下で、１次元的運動をしている粒子を考える。この問題でエネルギー準位と対応する固有関数は、分かっていると仮定する。いまこの粒子に、時間に依存するポテンシャルで表される **進行パルス** をかけた。

a. $t = -\infty$ で粒子は基底状態にあり、エネルギー固有関数は $\langle x|i\rangle = u_i(x)$ であることが分かっていたとする。$t = +\infty$ で、系がエネルギー固有関数 $\langle x|f\rangle = u_f(x)$ を持つ、ある励起状態に見いだされる確率を求めよ。

b. (a) で得た結果を、δ 関数のパルスとは **調和摂動** (harmonic perturbations) の重ね合わせとして見なせることを用いて、物理的に解釈せよ。

$$\delta(x-ct) = \frac{1}{2\pi c}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\ e^{i\omega(x/c-t)}$$

を思い出せ。摂動が非常に長い時間にわたってかかっている限り、量子力学的にも成立するエネルギー保存則の役割を強調せよ。

［解答］

a. 時間を含む１次の摂動論を用いる。$\hbar\omega_0 = E_f - E_i$ とする。

$$\begin{aligned}
V &= \delta(x-ct)\\
V_{fi} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ u_f^*(x)\delta(x-ct)u_i(x)\\
&= u_f^*(ct)u_i(ct)\\
c_f^{(1)}(t=\infty) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} dt\ e^{i\omega_0 t}u_f^*(ct)u_i(ct)\\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ u_f^*(x)\frac{1}{c}e^{i\omega_0 x/c}u_i(x)\\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\langle f|\frac{1}{c}e^{i\omega_0 x/c}|i\rangle
\end{aligned}$$

となる。求める確率は

$$P_f(t=\infty) = |c_f^{(1)}(t=\infty)|^2 = \frac{1}{c^2\hbar^2}\left|\langle f|e^{i\omega_0 x/c}|i\rangle\right|^2$$

で与えられる。

b. δ 関数を振動数 ω の調和摂動の重ね合わせとしてみなすと、

$$V = \delta(x-ct)$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\left[\frac{1}{c}e^{i(\omega/c)x}\right]e^{-i\omega t}\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}V(\omega)e^{-i\omega t}\\
V_{fi} &= \langle f|\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\left[\frac{1}{c}e^{i(\omega/c)x}\right]e^{-i\omega t}|i\rangle\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}\langle f|\left[\frac{1}{c}e^{i(\omega/c)x}\right]|i\rangle e^{-i\omega t}\\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}V_{fi}(\omega)e^{-i\omega t}
\end{aligned}
$$

と書ける。ここで、摂動の ω 成分を

$$
V_{fi}(\omega) = \langle f|\left[\frac{1}{c}e^{i(\omega/c)x}\right]|i\rangle
$$

と定義した。したがって、遷移振幅は

$$
\begin{aligned}
c_f^{(1)}(t=\infty) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{i\omega_0 t}V_{fi}(t)\\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{i\omega_0 t}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}V_{fi}(\omega)e^{-i\omega t}\\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}V_{fi}(\omega)\int_{-\infty}^{+\infty}dte^{i(\omega_0-\omega)t}\\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d\omega}{2\pi}V_{fi}(\omega)2\pi\underline{\delta(\omega_0-\omega)}\\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)V_{fi}(\omega_0)\\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\langle f|\frac{1}{c}e^{i\omega_0/cx}|i\rangle
\end{aligned}
$$

となる。求める確率は $P_f(t=\infty) = |c_f^{(1)}(t=\infty)|^2$ で与えられ、 a. の結果と一致する。

教科書の調和摂動の節で学んだように、振動数 ω で振動している外場はエネルギー量子 $\hbar\omega$ をやりとりする。したがって、エネルギー保存則より、一次の摂動で（すなわち、エネルギー量子を 1 つだけ **吸収** することで）エネルギー差 $\hbar\omega_0$ の励起状態を励起するのに有効なのは、外場の振動数 $\omega = \omega_0$ の成分のみである。上式の下線部の δ 関数は、量子力学的に導出されたエネルギー保存則を表している。

問２８　**基底状態** $[(n,l,m)=(1,0,0)]$ にある **水素原子** が、コンデンサーの平板の間に置かれている。時間に依存するが空間的には一様な電場（ポテンシャルではない）が、次のようにかけられた：

$$\boldsymbol{E} = \begin{cases} 0 & t<0\text{に対して} \\ \boldsymbol{E}_0 e^{-t/\tau} & t>0\text{に対して} \end{cases} \qquad (\boldsymbol{E}_0\text{は}z\text{軸の正方向を向いている})$$

時間を含む１次の摂動論を用いて、$t \gg \tau$ で原子が三種の 2p 状態 $(n,l,m)=(2,1,\pm1\text{または}0)$ のそれぞれに見いだされる確率を計算せよ。同じ問題を 2s 状態 $(n,l,m)=(2,0,0)$ に対しても解け。動径積分の計算を試みる必要はないが、他の（角度と時間に関する）積分はすべて実行せよ。

［解答］摂動ポテンシャルは

$$\begin{aligned} V &= -zeE_z e^{-t/\tau}\theta(t) \\ z &= \sqrt{\frac{4\pi}{3}}T^{(k=1)}_{q=0} \end{aligned}$$

であるから、 m 選択則 と **パリティ選択則** を考慮して行列要素

$$\begin{aligned} V_{2s,1s} &= V_{2pm=\pm1,1s}=0 \\ V_{2pm=0,1s} &= \Delta V e^{-t/\tau}\theta(t) \end{aligned}$$

を得る。$\Delta V = -\langle 2pm=0|zeE_z|1s\rangle$ は、電場 $\boldsymbol{E}$ によって電子の軌道半径程度の距離にできる電位差で、実際に積分を行うと

$$\Delta V = -\frac{2^8}{3^5\sqrt{2}}a_0 eE_z$$

であることが分かる。したがって、遷移振幅と遷移確率は

$$\begin{aligned} c_{2s}(t=\infty) &= c_{2p\pm1}(t=\infty)=0 \\ c^{(1)}_{2pm=0}(t=\infty) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\Delta V\int_0^\infty e^{i\omega_0 t}e^{-t/\tau} \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\frac{\Delta V}{1/\tau - i\omega_0} \\ P_{2s}(t=\infty) &= P_{2p\pm1}(t=\infty)=0 \\ P^{(1)}_{2pm=0}(t=\infty) &= \frac{(\Delta V)^2}{(\hbar\tau^{-1})^2+(\hbar\omega_0)^2} \end{aligned}$$

となる。

問２９　２個の **スピン** $1/2$ **の構成要素** からなる複合系を考える。$t<0$ ではハミルトニアンはスピンに依存せず、エネルギーの尺度を適当に合わせるとゼロにとることができる。$t>0$ ではハミルトニアンは

$$H = \left(\frac{4\Delta}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2\right)$$

で与えられる。$t \le 0$ で系が $|+-\rangle$ の状態にあったとする。
系が $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle$ および $|--\rangle$ の状態のそれぞれに見いだされる確率を、時間の関数として次のようにして求めよ。
a. 問題を厳密に解くことにより。

b. 時間を含む１次の摂動論が使えると仮定し、H を $t=0$ で入れられた摂動として問題を解くことにより。
どのような条件のとき、(b) は正しい結果を与えるか。

［解答］

a.

$$\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 = S_{1z}S_{2z} + \frac{1}{2}(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+})$$

より、H の行列表示は

$$H \doteq \Delta \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |++\rangle & |+-\rangle & |-+\rangle & |--\rangle \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right] \end{array}$$

となるので、摂動で二つの状態 $|-+\rangle$ と $|+-\rangle$ のみが混ざり合う。中央の 2×2 の行列を対角化すれば、固有ケットとして **スピン三重項状態** $|\alpha\rangle = (|+-\rangle + |-+\rangle)/\sqrt{2}$ と **スピン一重項状態** $|\beta\rangle = (|+-\rangle - |-+\rangle)/\sqrt{2}$ を得る。それぞれの固有エネルギーは

$$E_\alpha = \Delta \text{と} E_\beta = -3\Delta$$

である。

ケット $|+-\rangle$ をエネルギー固有ケットで展開して時間発展を求めよう。

$$|+-\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle + |\beta\rangle)$$

$$
\begin{aligned}
|+-;t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha\rangle e^{-i\Delta t/\hbar} + |\beta\rangle e^{+i3\Delta t/\hbar}) \\
&= \frac{1}{2}(e^{-i\Delta t/\hbar} + e^{+i3\Delta t/\hbar})|+-\rangle \\
&\quad +\frac{1}{2}(e^{-i\Delta t/\hbar} - e^{+i3\Delta t/\hbar})|-+\rangle
\end{aligned}
$$

となるので、時刻 t における各状態の確率は

$$
\begin{aligned}
P_{++}(t) &= P_{--}(t) = 0 \\
P_{+-}(t) &= \cos^2(2\frac{\Delta}{\hbar}t) \\
P_{-+}(t) &= \sin^2(2\frac{\Delta}{\hbar}t)
\end{aligned}
$$

となる。

b. 時間を含む 1 次の摂動論で計算してみよう。非摂動ハミルトニアンはゼロであるから、

$$
\begin{aligned}
V_{|-+\rangle,|+-\rangle} &= 2\Delta\theta(t) \\
c_{-+}^{(1)} &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t dt' 2\Delta \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right) 2\Delta t \\
P_{-+}^{(1)}(t) &= \frac{4\Delta^2}{\hbar^2}t^2
\end{aligned}
$$

となる。

$t \ll \hbar/2\Delta$ のとき、(a.) で求めた厳密解は

$$
P_{-+}(t) = \sin^2(2\frac{\Delta}{\hbar}t) \sim \frac{4\Delta^2}{\hbar^2}t^2
$$

と近似される。よって、1 次の摂動論が有効な条件は

$$
t \ll \hbar/2\Delta
$$

である。

問３０ $E_1 < E_2$ の **２準位系** を考える。２準位系を結ぶ時間に依存する次のようなポテンシャルがある：

$$V_{11} = V_{22} = 0,\ V_{12} = \gamma e^{i\omega t},\ V_{21} = \gamma e^{-i\omega t} \qquad (\gamma \text{は実数})$$

$t = 0$ では下の準位のみに状態が分布していたこと — すなわち $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$— が分かっている。

a. $t > 0$ での $|c_1(t)|^2$,$|c_2(t)|^2$ を、連立微分方程式

$$i\hbar \dot{c}_k = \sum_{n=1}^{2} V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn} t} c_n \quad (k = 1, 2))$$

を厳密に解いて求めよ。［$\omega_{21} \equiv (E_2 - E_1)/\hbar$］

b. 同じ問題を時間を含む摂動論を用い、有限な解を与える最低次の次数で解け。この二つの方法を γ が小さい値のとき比較せよ。次の二つの場合を別々に扱え：(i)ω が ω_{21} と非常に異なる場合、(ii)ω が ω_{21} と近い場合

［解答］

a. $\hbar\omega_{21} = E_2 - E_1$ とすれば、c_1, c_2 に関する連立微分方程式は

$$\left\{ \begin{array}{lcl} i\hbar \dfrac{dc_1}{dt} &=& \gamma \exp\left[i(\omega - \omega_{21})t\right] c_2(t) \\ i\hbar \dfrac{dc_2}{dt} &=& \gamma \exp\left[-i(\omega - \omega_{21})t\right] c_1(t) \end{array} \right. \tag{1}$$

となる。この方程式を互いに代入して、c_1 のみ、c_2 のみの微分方程式を作ると

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \dfrac{d^2 c_1}{dt^2} &=& +i(\omega - \omega_{21}) \dfrac{dc_1}{dt} - \dfrac{\gamma^2}{\hbar^2} c_1(t) \\ \dfrac{d^2 c_2}{dt^2} &=& -i(\omega - \omega_{21}) \dfrac{dc_2}{dt} - \dfrac{\gamma^2}{\hbar^2} c_2(t) \end{array} \right. \tag{2}$$

を得る。ここで、一階微分の項を消去するために **位相変換**

$$\left\{ \begin{array}{lcl} c_1(t) &=& a_1(t) \exp\left[+\dfrac{i}{2}(\omega - \omega_{21})t\right] \\ c_2(t) &=& a_2(t) \exp\left[-\dfrac{i}{2}(\omega - \omega_{21})t\right] \end{array} \right.$$

を行い、この変換を式 (2) に代入して $a_1(t)$ と $a_2(t)$ に対する微分方程式

$$\begin{cases} \dfrac{d^2a_1}{dt^2} &= -\left(\dfrac{\gamma^2}{\hbar^2}+\dfrac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}\right)a_1(t) \\ \dfrac{d^2a_2}{dt^2} &= -\left(\dfrac{\gamma^2}{\hbar^2}+\dfrac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}\right)a_2(t) \end{cases}$$

を得る。

$a_1(t)$ と $a_2(t)$ の一般解は

$$\begin{cases} a_1(t) &= A_1\cos\Omega t + B_1\sin\Omega t \\ a_2(t) &= A_2\cos\Omega t + B_2\sin\Omega t \end{cases} \tag{3}$$

と書ける。ただし

$$\Omega=\sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}+\frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}}$$

である。

$c_1(t)$ と $c_2(t)$ の一般解は、式 (3) を位相変換の式 (2) に代入して

$$\begin{cases} c_1(t) &= (A_1\cos\Omega t + B_1\sin\Omega t)\exp\left[+\frac{i}{2}(\omega-\omega_{21})t\right] \\ c_2(t) &= (A_2\cos\Omega t + B_2\sin\Omega t)\exp\left[-\frac{i}{2}(\omega-\omega_{21})t\right] \end{cases} \tag{4}$$

となる。

さて、初期条件と式 (4) から

$$\begin{cases} c_1(t=0) &= A_1 = 1 \\ c_2(t=0) &= A_2 = 0 \end{cases} \tag{5}$$

であり、式 (5) を式 (1) に代入して

$$\begin{cases} \dfrac{dc_1}{dt}(t=0) &= \dfrac{i}{2}(\omega-\omega_{21})A_1+\Omega B_1 = 0 \\ \dfrac{dc_2}{dt}(t=0) &= -\dfrac{i}{2}(\omega-\omega_{21})A_2+\Omega B_2 = \dfrac{\gamma}{i\hbar} \end{cases}$$

を得る。よって、4 つの積分定数は

$$\begin{cases} A_1 = 1 & B_1 = -\dfrac{i(\omega-\omega_{21})/2}{\Omega} \\ A_2 = 0 & B_2 = \dfrac{\gamma}{i\hbar\Omega} \end{cases}$$

となる。したがって、遷移振幅は

$$\begin{cases} c_1(t) &= \left(\cos \Omega t - \dfrac{i(\omega - \omega_{21})/2}{\Omega} \sin \Omega t\right) \exp\left[+\dfrac{i}{2}(\omega - \omega_{21})t\right] \\ c_2(t) &= \dfrac{\gamma / i\hbar}{\Omega} \sin \Omega t \exp\left[-\dfrac{i}{2}(\omega - \omega_{21})t\right] \end{cases}$$

となって、（**ラビの公式**）

$$\begin{aligned} |c_2(t)|^2 &= \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t \\ |c_1(t)|^2 &= 1 - |c_2(t)|^2 \\ &= \cos^2 \Omega t + \frac{(\omega - \omega_{21})^2/4}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t \end{aligned}$$

が導かれる。

b. 1. ω と ω_{21} が非常に異なるとき時間に依存した摂動論により

$$\begin{aligned} c_1^{(0)}(t) &= 1 \\ c_2^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' \exp(i\omega_{21} t') V_{21}(t') \\ &= \frac{-i\gamma}{\hbar} \int_0^t dt' \exp[-i(\omega - \omega_{21})t'] \\ &= \frac{\gamma}{\hbar} \cdot \frac{\exp[-i(\omega - \omega_{21})t] - 1}{\omega - \omega_{21}} \end{aligned}$$

となる。

2. $\omega \approx \omega_{21}$ の場合、時間に依存した摂動論により

$$\begin{aligned} c_1^{(0)}(t) &= 1 \\ c_2^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' \exp(i\omega_{21} t) V_{21}(t') = \frac{-i\gamma}{\hbar} \int_0^t dt' \exp[-i(0)t'] \\ &= \frac{-i\gamma}{\hbar} t \end{aligned}$$

となる。

問３１ ゆっくりと摂動を入れていくと（$V \to Ve^{\eta t}$ とすると）、式 (5.6.36)

$$c_n^{(2)} = \frac{i}{\hbar}\sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{E_m - E_i}\int_0^t (e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nm}t'})dt'$$

の第２項の寄与を算出できることを示せ。（Baym 1969,p.257）。

［解答］

$t = -\infty$ から摂動をゆっくりとかける方法 $V \to Ve^{\eta t}$ を用いよう。

$$\begin{aligned}
c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m V_{nm}V_{mi}\int_{-\infty}^t dt' \exp\left[i(\omega_{nm} - i\eta)t'\right]\int_{-\infty}^{t'} dt'' \exp\left[i(\omega_{mi} - i\eta)t''\right] \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \sum_m V_{nm}V_{mi}\int_{-\infty}^t dt' \exp\left[i(\omega_{nm} - i\eta)t'\right]\frac{\exp\left[i(\omega_{mi} - i\eta)t'\right]}{i(\omega_{mi} - i\eta)} \\
&= \left(\frac{i}{\hbar}\right)\sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{E_m - E_i - i\hbar\eta}\int_{-\infty}^t dt' \exp\left[i(\omega_{ni} - 2i\eta)t'\right] \\
&= \sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{E_m - E_i - i\hbar\eta}\frac{\exp\left[i(\omega_{ni} - 2i\eta)t\right]}{E_n - E_i - 2i\hbar\eta} \\
&\to \sum_{m\neq i}\left(\frac{V_{nm}V_{mi}\exp\left[i(\omega_{ni} - 2i\eta)t\right]}{(E_m - E_i)(E_n - E_i)} + i\pi V_{nm}V_{mi}\frac{\exp(i\omega_{ni}t)}{E_n - E_i}\delta(E_m - E_i)\right)
\end{aligned}$$

となる。ただし、$\epsilon = \hbar\eta$ は正の微小量とし、公式

$$\frac{1}{x - i\eta} = P\frac{1}{x} + i\pi\delta(x)$$

を用いた [13]。

問３２

a. 第３章問題３で解いた **ポジトロニウム** の問題を考える。z 軸に沿って均一な静磁場があるとき、ハミルトニアンは

$$H = A\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 + \left(\frac{eB}{m_e c}\right)(S_{1z} - S_{2z})$$

で与えられる。縮退がなく時間を含まない摂動論を用いて（ハミルトニアンを対角化する代わりに）この問題を解き、四つのすべての状態のエネルギー準位を求めよ。H の表式の第１項と第２項を、それぞれ H_0 と V と見なせ。求めた結果を厳密な表式

$$E = -\left(\frac{\hbar^2 A}{4}\right)\left[1 \pm 2\sqrt{1 + 4\left(\frac{eB}{m_e c\hbar A}\right)^2}\right],$$

$$\left\{\begin{array}{l} \text{一重項} m = 0 \\ \text{三重項} m = 0 \end{array}\right\} \text{に対して}$$

$$E = \frac{\hbar^2 A}{4}, \quad \text{三重項} \quad m = \pm 1 \text{に対して}$$

と比較せよ。ここで三重項（一重項）$m = 0$ とは、$B \to 0$ のとき $m = 0$ の純粋な三重項（一重項）になる状態を表す。

b. いまこの二つの $m = 0$ の状態間に、「適切な」振動数の **振動磁場** をかけることにより（ **誘導放出** か **吸収** を通じて）遷移を起こさせようとする。磁場を z 軸方向にかけなければいけないか、それとも x 軸（y 軸）方向にかけなければいけないか。選んだ答が正しいことを示せ。（はじめからある静磁場は、ずっと z 軸に沿っていると仮定する。）

［解答］非摂動ハミルトニアンを

$$H_0 = A\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$$

ととると、摂動を受けない固有ケットと固有エネルギーは、問２９より

$$\begin{aligned} |s = 0, m = \ 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) \\ |s = 1, m = \ 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \\ |s = 1, m = +1\rangle &= |++\rangle \end{aligned}$$

$$|s=1,m=-1\rangle \;=\; |--\rangle$$

および

$$\begin{aligned}
H_0|s=0,m=0\rangle &= -3A\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2|s=0,m=0\rangle \\
H_0|s=1,m=0\rangle &= A\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2|s=1,m=0\rangle \\
H_0|s=1,m=1\rangle &= A\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2|s=1,m=1\rangle \\
H_0|s=1,m=-1\rangle &= A\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2|s=1,m=-1\rangle
\end{aligned}$$

となる。摂動ポテンシャル

$$V=\left(\frac{eB}{m_ec}\right)(S_{1z}-S_{2z})$$

の行列要素は、非対角要素

$$\begin{aligned}
&\langle s=0,m=0|V|s=1,m=0\rangle \\
&= \langle s=1,m=0|V|s=0,m=0\rangle \\
&= \left(\frac{eB}{m_ec}\right)\hbar
\end{aligned}$$

以外はすべてゼロになるので、摂動で混ざるケット $|s=0,m=0\rangle$ と $|s=1,m=0\rangle$ が張る部分空間のみを考えればよい。$|s=0,m=0\rangle$ と $|s=1,m=0\rangle$ の固有エネルギーは異なるので、縮退のない場合の摂動論が使える。摂動ポテンシャルの対角要素がすべてゼロなので、摂動の 1 次のエネルギー変化はゼロである。

次に、2 次の摂動論を用いるとエネルギー変化は

$$\begin{aligned}
\Delta^{(2)}_{s=0,m=0} &= \frac{|\langle s=0,m=0|V|s=1,m=0\rangle|^2}{E_{s=0,m=0}-E_{s=1,m=0}} = -\left(\frac{eB}{m_ec}\right)^2\frac{1}{A} \\
\Delta^{(2)}_{s=1,m=0} &= \frac{|\langle s=1,m=0|V|s=0,m=0\rangle|^2}{E_{s=1,m=0}-E_{s=0,m=0}} = +\left(\frac{eB}{m_ec}\right)^2\frac{1}{A}
\end{aligned}$$

となる。

以上の結果をまとめると、B の2次までの範囲で

$$
\begin{aligned}
E_{s=0,m=0} &= -3\left(\frac{\hbar^2 A}{4}\right) - \left(\frac{eB}{m_e c}\right)^2 \frac{1}{A} \\
E_{s=1,m=0} &= +\left(\frac{\hbar^2 A}{4}\right) + \left(\frac{eB}{m_e c}\right)^2 \frac{1}{A} \\
E_{s=1,m=\pm 1} &= \left(\frac{\hbar^2 A}{4}\right)
\end{aligned}
$$

となる。これは、厳密解を B の2次まで展開したものに一致している。

b. 2つの $m=0$ の状態を結ぶ摂動ポテンシャルの行列要素は

$$V = \langle \text{「三重項」}, m=0|T^{(1)}_{m'}|\text{「一重項」}, m=0\rangle$$

の形をしているが、**m選択則** より $m'=0$ である。すなわち適切な振動数

$$\omega = \frac{1}{\hbar}(E_{s=1,m=0} - E_{s=0,m=0}) = \hbar A + \frac{2}{\hbar A}\left(\frac{eB}{m_e c}\right)^2$$

の磁場を z 方向にかける必要がある。

【Q&A】
Q: **オコロコフ効果** とは何か。
A: **2準位系の共鳴** を研究してノーベル賞を受賞しそこなった人に、旧ソ連のオコロコフ博士がいる。彼は、速度 v のイオンが、原子間隔 d の原子列に平行に走っている（チャネリング現象）とき、イオンの電子の基底エネルギーと励起エネルギーの差 ΔE が条件 $\Delta E = nhv/d$ （nは整数）を満せば電子が激しく励起されることを発見した。[19]

問３３　励起された原子による **光子の自発放出** を考える。この過程は E1 **遷移** であることがわかっている。原子の磁気量子数は 1 単位だけ減少すると仮定しよう。放出光子の角度分布はどのようになるか。また **光子の偏極** を、全体（原子と光子）の系に対する **角運動量保存** に注意して議論せよ。

光子の吸収の場合と同様にして時間に依存した摂動論を用いる。

$$V_{fi} = \frac{-eA}{m_e c}\left[\exp\left(-i\frac{\omega}{c}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{x}\right)\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p}\right]_{fi}$$

であるから、 **電気双極子近似** を用いれば、

$$w_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m_e^2 c^2}|A|^2 \left|\langle f|\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle\right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega)$$

となる。ただし、始状態と終状態を

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |n, l, m\rangle \\ |f\rangle &= |n', l', m' = m-1\rangle \end{aligned}$$

ととった。 **ウィグナー・エッカールトの定理より**

$$\begin{aligned} |\langle f|p_x|i\rangle|^2 &= |\langle f|p_y|i\rangle|^2 \\ |\langle f|p_z|i\rangle|^2 &= 0 \end{aligned}$$

となる。したがって、$\hat{\boldsymbol{\epsilon}}$ が、光子の放出方向 $\hat{\boldsymbol{n}}$ に直交することに注意すれば、

$$w_{i\to f} \propto \cos^2\theta$$

となる。ただし、$\hat{\boldsymbol{n}}$ と z 軸のなす角を θ とおいた。

問３４　１個の電子と電荷１（$Z = 1$）の **三重水素核**（^3H）からできた原子を考える。はじめ、系は **基底状態**（$n = 1, l = 0$）にあった。核の電荷が１単位だけ急に増加した（現実には１個の電子と１個の **反ニュートリノ** を **放出** した）と仮定しよう。これは三重水素核が質量３の **ヘリウム核**（$Z = 2, ^3He$）に変換したことを意味する。この系が新しいヘリウムイオンの **基底状態** に見いだされる確率を求めよ。水素の波動関数は

$$\phi_{n=1,l=0}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

で与えられる。

［解答］　核の電荷が急に変化するあいだ、電子の波動関数はほとんど変化しないと考えられる。よって、ヘリウムイオンの基底状態に見いだされる確率は、

$$\begin{aligned} P_{He;1s} &= |\langle He; 1s|H; 1s\rangle|^2 \\ &= \int_0^\infty r^2 dr R_{He;1s}(r) R_{H;1s}(r) \end{aligned}$$

である。核の電荷が Z の **水素様原子** の基底状態は

$$R_{Z;1s}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0}$$

であるから、

$$P_{He;1s} = \frac{2^9}{3^6}$$

となる。

問３５　**水素原子** の基底状態 $(n=1, l=0)$ が、時間に依存する次のようなポテンシャルを受ける：

$$V(\boldsymbol{x}\ ,t)=V_0\cos(kz-\omega t).$$

時間を含む摂動論を用いて、運動量 $\boldsymbol{p}$ を持つ電子が放出される遷移率の表式を求めよ。特に、放出電子の角度分布を（z 軸に対して定義される θ と ϕ を用いて）どのように計算したらよいかを示せ。この問題と（もっと現実的な）**光電子効果** との類似点と相違点を簡潔に述べよ。
（ノート：初期状態の波動関数に関しては、問題３４を見よ。規格化上の困難があれば終状態の波動関数を

$$\phi_f(\boldsymbol{x}\ )=\frac{1}{L^{3/2}}e^{i\boldsymbol{p}\ \cdot\boldsymbol{x}\ /\hbar}$$

のようにとってよい。L は非常に大きいとするが、観測できる効果は L に依らないことを示せなければならない。）

［解答］摂動ポテンシャルは、

$$\begin{aligned} V(\boldsymbol{x}\ ,t) &= V_0\cos(kz-\omega t) \\ &= \frac{V_0}{2}(e^{ikz-i\omega t}+e^{-ikz+i\omega t}) \end{aligned}$$

であるから、電子が場からエネルギーを **吸収** する行列要素は

$$\mathcal{V}^{\dagger}_{ni}=\frac{V_0}{2}[e^{ikz}]_{ni}$$

である。したがって、遷移確率は

$$w_{i\to n}=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{|V_0|^2}{4}\left|\langle\boldsymbol{p}\ |e^{ikz}|1s\rangle\right|^2\delta(E_p-E_{1s}-\hbar\omega) \tag{1}$$

となる。

始状態と終状態の波動関数

$$\begin{aligned} \phi_i(\boldsymbol{x}\ ) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}a^{3/2}}e^{-r/a_0} \\ \phi_f(\boldsymbol{x}\ ) &= \frac{1}{L^{3/2}}e^{i\boldsymbol{p}\ \cdot\boldsymbol{x}\ /\hbar} \end{aligned}$$

を用いて行列要素を計算しよう。問３９の結果を用いると

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{p}\ |e^{ikz}|1s\rangle &= \int d^3x \frac{1}{L^{3/2}} e^{-i\boldsymbol{p}\ \cdot \boldsymbol{x}\ /\hbar} e^{ikz} \frac{1}{\sqrt{\pi} a^{3/2}} e^{-r/a_0} \\ &= \frac{8\sqrt{\pi}}{(La_0)^{3/2}} \frac{1/a_0}{(q^2+1/a_0^2)^2} \qquad (2)\end{aligned}$$

となる。ただし、$\boldsymbol{q}\ = \boldsymbol{p}\ /\hbar - k\hat{\boldsymbol{e}}\ _z$ とおいた。式 (2) を式 (1) に代入して、遷移確率

$$w_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|V_0|^2}{4} \frac{64\pi}{(La_0)^3} \frac{1/a_0^2}{(q^2+1/a_0^2)^4} \delta(E_p - E_{1s} - \hbar\omega) \qquad (3)$$

を得る。

ここで、この外場によるエネルギー流束を計算しよう。ポテンシャルが作る電場は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E} &= -\frac{1}{e}\nabla V(\boldsymbol{x}\ ,t) \\ &= \frac{1}{e} V_0 k \sin(kz-\omega t)\hat{\boldsymbol{e}}\ _z\end{aligned}$$

であるから、電場によるエネルギー密度およびエネルギー流束は、式 (5.7.12) より

$$\begin{aligned}\mathcal{U} &= \frac{(V_0 k)^2}{16\pi e^2} \\ \frac{\omega}{k}\mathcal{U} &= \frac{V_0^2 k\omega}{16\pi e^2}\end{aligned}$$

となる。したがって、 **微分断面積** は、式 (5.7.10)、式 (5.7.31) より、

$$\begin{aligned}d\sigma &= \frac{\hbar\omega w_{i\to f}}{V_0^2 k\omega/16\pi e^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{p}{\hbar} dE_p d\Omega \\ \frac{d\sigma}{d\Omega} &= 32 e^2 \frac{p}{\hbar} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2 k}\right) \left(\frac{1}{a_0^5}\right) \frac{1}{(q^2+1/a_0^2)^4}\end{aligned}$$

となる。この結果は、微分断面積の因子の置き換え

$$\frac{(\boldsymbol{\epsilon}\ \cdot \boldsymbol{k}\ _f)^2}{mc\omega} \to \left(\frac{2m_e}{\hbar^2 k}\right)$$

を除いて、光電子効果の微分断面積と同一である。放出電子の角度分布は、放出電子が原子から受け取る運動量 $\boldsymbol{q}$ の関数として決まる。

光電子効果との相違は、電磁波の摂動ポテンシャル中の因子 $(\boldsymbol{\epsilon}\ \cdot \boldsymbol{p}\ )$ に由来する。 **光電子効果** の場合は、 **直線偏光** の電磁波を吸収した場合に電場ベクトルの方向に電子を放出しやすい。ポテンシャル V の場合は、偏光ベクトルのような特定の方向がないので角度分布は ϕ に依存しない。

問３６　2次元空間の **自由粒子** の **状態密度** を表す式を導け。すなわち、3次元の状態密度

$$\rho_3(E)dEd\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right) dEd\Omega, \left(\boldsymbol{k} \equiv \frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}, E = \frac{\boldsymbol{p}^{\,2}}{2m}\right)$$

の2次元の類似式であるが、答を k（または E）の関数に $dEd\phi$ をかけた形に書くこと。この ϕ は固定軸との間の角度で、2次元内の運動量の方向を記述する。

［解答］一辺 L の正方形内で周期的境界条件を満たす、規格化した波動関数

$$\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{L}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

を考える。ただし、

$$\boldsymbol{k} = (k_x, k_y) = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y) \quad n_x, n_y \text{は整数}$$

である。波数とエネルギーとの関係 $E = \hbar^2 k^2/2m$ より、

$$dEd\phi = \frac{\hbar^2 k}{m} dkd\phi$$

である。よって、2次元自由粒子の状態密度 $\rho_2(E)$

$$\rho_2(E)dEd\phi = \frac{kdkd\phi}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} = \frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 dEd\phi$$

が得られる。$\rho_2(E)$ が、エネルギーに依存しない定数であることに注目したい。

問３７　１次元空間内を運動するように制限された質量 m の粒子が、無限に高い壁のポテンシャル

$$\begin{aligned} V &= \infty \qquad x<0, x>L \text{に対して} \\ V &= 0 \qquad 0 \le x \le L \text{に対して} \end{aligned}$$

によって、$0 < x < L$ 内に **束縛** されている。高いエネルギーに対して状態密度 $\rho_1(E)$（すなわち、単位エネルギー間隔あたりの状態数）の表式を、E の関数として求めよ。（得られた答えの次元を確かめよ。）

［解答］束縛された粒子の規格化したエネルギー固有関数

$$\phi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(kx)$$

を考える。ただし、

$$k = \frac{n\pi}{L} \quad n \text{は正の整数}$$

である。波数とエネルギーとの関係 $E = \hbar^2k^2/2m$ より、

$$dE = \frac{\hbar^2 k}{m}dk$$

である。よって、高いエネルギー $(E \gg \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2)$ に対して状態密度

$$\begin{aligned} \rho_1^{\text{束縛}}(E)dE &= \frac{dk}{\left(\frac{\pi}{L}\right)} \\ &= \frac{m}{\hbar^2 k}\left(\frac{L}{\pi}\right)dE \\ &= \sqrt{\frac{m}{2}}\left(\frac{L}{\hbar\pi}\frac{1}{\sqrt{E}}\right)dE \end{aligned}$$

が得られる。

得られた状態密度 $\rho_1^{\text{束縛}}(E)$ の次元は、予想されるように「エネルギー」$^{-1}$ である。

問３８　角振動数 ω の **直線偏光** が、角振動数 ω_0 の **３次元等方的調和振動子** の基底状態で波動関数が近似できる一電子「原子」に当たる。 **光電子放出** の **微分断面積** は、運動量 $\hbar k_f$ の放出電子が平面波状態にあると見なせるとき

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\alpha\hbar^2 k_f^3}{m^2\omega\omega_0}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}}\exp\left\{-\frac{\hbar}{m\omega_0}\left[k_f^2+\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right]\right\} \times \sin^2\theta\cos^2\phi\exp\left[\left(\frac{2\hbar k_f\omega}{m\omega_0 c}\right)\cos\theta\right]$$

で与えられることを示せ。（ここに使われている座標系は、図に示されたものである。）

［解答］

光電子効果の微分断面積の表式 (5.7.32)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi^2\alpha\hbar}{m_e^2\omega}\left|\langle \boldsymbol{k}_f|e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}}\,\hat{\boldsymbol{\epsilon}}\cdot\boldsymbol{p}\,|i\rangle\right|^2\frac{m_e k_f L^3}{\hbar^2(2\pi)^3}$$

において、始状態 $|i\rangle$ を３次元調和振動子の基底状態にとればよい。

K殻電子のときと同様にして、行列要素

$$\langle \boldsymbol{k}_f|e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}}\,\hat{\boldsymbol{\epsilon}}\cdot\boldsymbol{p}\,|i\rangle$$

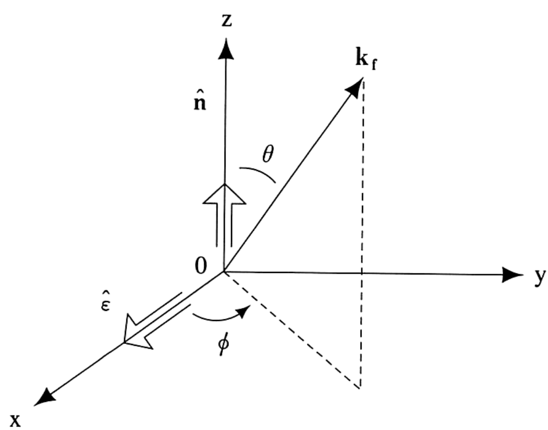


図 5.3: 座標系

$$
\begin{aligned}
&= \frac{(\hbar\hat{\epsilon}\ \cdot \boldsymbol{k}_{\ f})}{L^{3/2}} \int d^3 x e^{-i\boldsymbol{q}\ \cdot\boldsymbol{x}} \ \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{x^2+y^2+z^2}{\dfrac{2\hbar}{m\omega_0}}\right) \\
&= \frac{(\hbar\hat{\epsilon}\ \cdot \boldsymbol{k}_{\ f})}{L^{3/2}} \left(\frac{\hbar}{\pi m\omega_0}\right)^{3/4} \prod_{j=1,2,3} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-i\bar{q}_j\xi-\xi^2/2}\right] \\
&= \frac{(\hbar\hat{\epsilon}\ \cdot \boldsymbol{k}_{\ f})}{L^{3/2}} \left(\frac{4\hbar\pi}{m\omega_0}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{\hbar q^2}{2m\omega_0}\right)
\end{aligned}
$$

を得る。ただし、

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{q} &= \boldsymbol{k}_{\ f} - \left(\frac{\omega}{c}\right)\hat{\boldsymbol{n}} \\
q^2 &= k_f^2 - 2k_f\frac{\omega}{c}\cos\theta + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2
\end{aligned}
$$

とおいて、上式で 3 行目から 4 行目に移るさいに、**ガウス積分** の公式

$$
\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\alpha\xi^2 - i\beta\xi} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4\alpha}\right) \quad \left(|\arg\alpha| < \frac{\pi}{2}\right)
$$

を用いた。したがって、微分断面積は

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{4\alpha\hbar^2 k_f^3}{m^2\omega\omega_0}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}} \exp\left\{-\frac{\hbar}{m\omega_0}\left[k_f^2 + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right]\right\} \\
&\quad \times \sin^2\theta\ \cos^2\phi\ \exp\left[\left(\frac{2\hbar k_f\omega}{m\omega_0 c}\right)\cos\theta\right]
\end{aligned}
$$

で与えられる。

問３９　**基底状態** にある **水素原子** が、ある決まった運動量 $\boldsymbol{p}'$ を持つ確率 $\lvert\phi(\boldsymbol{p}')\rvert^2 d^3p'$ を求めよ。（これは３次元フーリエ変換の、とてもよい練習問題である。角度積分を実行するためには、z 軸を $\boldsymbol{p}'$ の方向に選べ。）

［解答］水素原子の基底状態の **運動量空間の波動関数** をもとめると、

$$
\begin{aligned}
\phi(\boldsymbol{p}') &= \langle \boldsymbol{p}'|\phi\rangle = \int d^3\boldsymbol{x}\ \langle \boldsymbol{p}'|\boldsymbol{x}\rangle\langle \boldsymbol{x}|\phi\rangle \\
&= \int d^3\boldsymbol{x}\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}{\hbar}\right)\frac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}\exp\left(\frac{-r}{a_0}\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}(2\pi\hbar a_0)^{3/2}}\int_0^{2\pi} d\phi\int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \\
&\quad\times\int_0^{+\infty} r^2dr\exp\left(-\frac{ipr\cos\theta}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-r}{a_0}\right) \\
&= \frac{2\sqrt{\pi}}{(2\pi\hbar a_0)^{3/2}}\int_0^{+\infty} r^2dr\frac{-\hbar}{ipr}\left[\exp\left(\frac{-ipr}{\hbar}\right)-\exp\left(\frac{+ipr}{\hbar}\right)\right]\exp\left(\frac{-r}{a_0}\right) \\
&= \frac{2\sqrt{\pi}}{(2\pi\hbar a_0)^{3/2}}\frac{i\hbar}{p}\left\{\frac{1}{(ip/\hbar+1/a_0)^2}-\frac{1}{(-ip/\hbar+1/a_0)^2}\right\} \\
&= \frac{8\sqrt{\pi}}{(2\pi\hbar a_0)^{3/2}}\frac{1/a_0}{((p/\hbar)^2+1/a_0^2)^2}
\end{aligned}
$$

となる。したがって、

$$
\lvert\phi(\boldsymbol{p}')\rvert^2 d^3p' = \frac{8}{a_0^5\pi^2\hbar^3}\left(\frac{1}{(p/\hbar)^2+1/a_0^2}\right)^4 d^3p'
$$

を得る。

問４０　**水素原子**に対して、$\tau(2p \to 1s)$ の表式を求めよ。これが 1.6×10^{-9}s に等しいことを確かめよ。

［解答］

簡単のために始状態が $|n=2, l=1, m=0\rangle$、
終状態が $|n=1, l=0, m=0\rangle$ の場合を誘導放出の類推で考えよう。行列要素が

$$\begin{aligned}\langle f|x|i\rangle &= \langle f|y|i\rangle = 0 \\ \langle f|z|i\rangle &= \frac{2^7}{3^5}\sqrt{2}a_0\end{aligned}$$

であることと、**光子の状態密度**が

$$\rho(\hbar\omega)dEd\Omega = \frac{\hbar^2\omega^2}{c^3}\frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3}dEd\Omega$$

となること使うと、時間に依存した１次の摂動論により、$\hat{\boldsymbol{n}}$ 方向に偏光 $\hat{\epsilon}$ を持った光子が放出される遷移率は

$$\begin{aligned}w_{i\to[f]} &= \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\rho(\hbar\omega)|_{\hbar\omega=E_i-E_f}d\Omega \\ &= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m_e^2c^2}|A_0|^2\left|\langle n|\exp\left(i\frac{\omega}{c}\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}\right)\hat{\epsilon}\cdot\boldsymbol{p}\,|i\rangle\right|^2\rho(\hbar\omega)d\Omega \\ &\approx \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2\omega_{fi}^2}{c^2}|A_0|^2\left|\hat{\epsilon}\cdot\langle n|\boldsymbol{x}\,|i\rangle\right|^2\rho(\hbar\omega)d\Omega\end{aligned}$$

となる。単位体積あたりの光子のエネルギーが

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2\pi}\frac{\omega^2}{c^2}|A_0|^2 = \frac{\hbar\omega}{L^3}$$

となるようにに $|A_0|$ をとった。放射光子の方向 $\hat{\boldsymbol{n}}$ について積分すると因子 $4\pi/3$ が、さらにふたつの偏光について和をとって因子 2 がでてくる。したがって、単位時間あたりの**全放出確率**

$$W = \frac{2^{17}}{3^{11}}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\omega_{if}^3}{c^2}a_0^2 = 6.264 \times 10^8(\mathrm{s}^{-1})$$

を得る。したがって、寿命

$$\tau(2p \to 1s) = 1.60 \times 10^{-9}(\mathrm{s})$$

を得る。

【Q & A】

Q： **双極子選択則** とは何か？

A：電気双極子近似をつかうと、原子による **光子の吸収放出** の断面積の式は、行列要素

$$\langle \alpha', j', m' | \boldsymbol{r} \, | \alpha, j, m \rangle$$

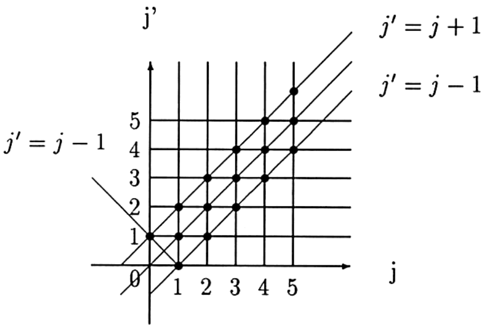
の絶対値の自乗に比例する。$\boldsymbol{r}$ は1階のテンソル演算子 $T^{(1)}_{q=\pm1,0}$ であるから、 **m選択則** と三角不等式

$$\begin{aligned} m' &= q + m \\ |j-1| &\leq j' \leq j+1 \end{aligned}$$

より

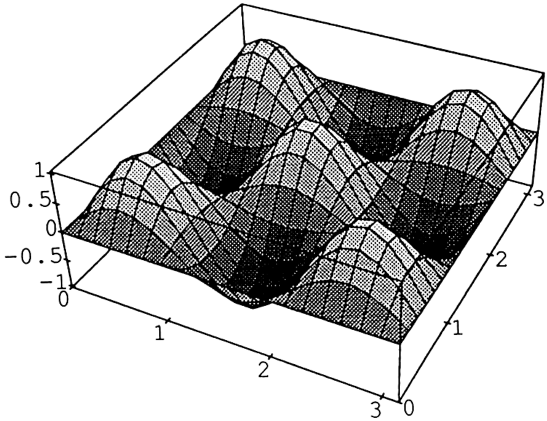
$$\begin{aligned} \Delta m &\equiv m' - m = \pm 1, 0 \\ \Delta j &\equiv j' - j = \pm 1, 0 \\ &\quad \text{ただし}\, j = 0 \to j' = 0 \text{ の遷移は禁止} \end{aligned}$$

がえられる。下の図をみよ。



第 6 章

同種粒子



問 1

a. **スピン** $1/2$ を持つ N 個の同一種類の粒子が、1 次元 **調和振動子** のポテンシャルの影響を受けている。**基底状態** のエネルギーはいくらか。**フェルミエネルギー** はいくらか。

b. 粒子間の相互作用を無視し N を非常に大きいと仮定したとき、基底状態のエネルギーとフェルミエネルギーはいくらか。

［解答］基底状態のエネルギーを E_0、フェルミエネルギーを E_f とする。

a. 1. N が偶数のとき、粒子は $n=0$ の状態から $n=N/2-1$ の状態まで完全に詰まるので

$$
\begin{aligned}
E_f &= \left[\frac{1}{2}+\left(\frac{N}{2}-1\right)\right]\hbar\omega = \frac{N-1}{2}\hbar\omega \\
E_0 &= 2\times\sum_{n=0}^{N/2-1}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{N^2}{4}\hbar\omega
\end{aligned}
$$

2. N が奇数のとき、粒子は $n=0$ の状態から $n=(N-3)/2$ の状態まで完全に詰まり、$n=(N-1)/2$ の状態が 1 粒子だけ詰まっているので、

$$
\begin{aligned}
E_f &= \left[\frac{1}{2}+\left(\frac{N-1}{2}\right)\right]\hbar\omega = \frac{N}{2}\hbar\omega \\
E_0 &= 2\times\sum_{n=0}^{(N-3)/2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{N}{2}\hbar\omega \\
&= \frac{(N-1)^2}{4}\hbar\omega + \frac{N}{2}\hbar\omega \\
&= \frac{N^2+1}{4}\hbar\omega
\end{aligned}
$$

b. $N\to\infty$ の極限で、偶数奇数にかかわらず、

$$
\begin{aligned}
E_f &= \frac{N}{2}\hbar\omega \\
E_0 &= \frac{N^2}{4}\hbar\omega
\end{aligned}
$$

となる。

問 2　同一種類ではない 2 個のスピン 1 の粒子が軌道角運動量を持たないとき（すなわち、ともに s 状態のとき）、$j=0, j=1, j=2$ の合成角運動量が作れるのは明らかである。ここで 2 粒子が 同一 であると仮定すると、どのような制限がつくか。

［解答］　問題の粒子が同一種類であると仮定すると、スピン 1 の粒子は **ボゾン** なので、全体の波動関数は対称的である。空間部分の波動関数はともに s 状態であるから対称的なので、スピン関数も対称的でなければならない。

第 3 章の問 2 0 の解答より、$j=0,1,2$ に対するスピン関数が得られるが、このうち 2 粒子の入れ替えに対して対称な $j=0,2$ であるものだけが許される。

問 3　もし電子がスピンを持たない **ボゾン** だとすると、**ヘリウム原子** のエネルギー準位にはどのようなことが起こるであろうか。できるだけ定量的に検討せよ。

［解答］

もし電子がスピンを持たないボゾンだとすると全体の波動関数は 2 電子の入れ替えに対して対称的である。この仮想的なヘリウム原子にはスピン波動関数が無いので、空間波動関数は粒子の交換に対して対称なものだけとなる。この対称な波動関数のエネルギー準位は、本物のパラヘリウム原子のエネルギー準位に等しい。教科書 6 章 4 節を参照せよ。

問 4　3 個のスピン 0 の同一種類の粒子が正三角形の頂点に位置している。z 軸をこの三角形の重心を通り面と垂直方向に向くように定義する。系全体は z 軸のまわりを自由に **回転** できる。統計的考察により、J_z に対応する磁気量子数についての制限を求めよ。

［解答］　系全体が z 軸のまわりを自由に回転できるので J_z は保存量である。系を１２０度回転させると粒子が入れ替わるが、スピン 0 の粒子の統計的性質から波動関数はもとの波動関数と一致しなければならない。しかもスピン 0 なので空間部分のみを考えればよい。

$$\exp\left(-\frac{iJ_z}{\hbar}\frac{2}{3}\pi\right)|m\rangle = \exp\left(-im\frac{2}{3}\pi\right)|m\rangle = |m\rangle$$

よって

$$\exp\left(-im\frac{2}{3}\pi\right) = 1$$

であるから、磁気量子数 m にたいして $m = 3n$ （n は整数）という制限がつく。

問5　弱く相互作用している3個の同一種類のスピン1の粒子を考える。
a.　状態ベクトルの空間部分は、任意の 対の交換に関して **対称** 的であることが分かっているとしよう。$|+\rangle|0\rangle|+\rangle$ は粒子1が $m_s = +1$、粒子2が $m_s = 0$、粒子3が $m_s = +1$ であることを表す。このような記号を用いて次の三通りの場合に、規格化されたスピン状態を構成せよ。

1. 3粒子ともすべて $|+\rangle$ 状態にある。
2. 2粒子が $|+\rangle$, 1粒子が $|0\rangle$ 状態にある。
3. 3粒子とも異なるスピン状態にある。

全スピンはそれぞれの場合にいくらか。

b. 同じ問題を、任意の対の交換に関して空間部分が **反対称** であるときに検討せよ。

［解答］

a. スピン1の粒子なので、任意の粒子の入れ替えに対して全体の波動関数は対称的である。問題より空間部分は対称的なのでスピン部分も対称的でなければならない。一粒子のケットが規格化されているとすれば、求めるスピン状態は

1. $|\alpha\rangle = |+\rangle|+\rangle|+\rangle$
2. $|\beta\rangle = (|0\rangle|+\rangle|+\rangle + |+\rangle|0\rangle|+\rangle + |+\rangle|+\rangle|0\rangle)/\sqrt{3}$
3. $|\gamma\rangle = (|+\rangle|0\rangle|-\rangle + |0\rangle|+\rangle|-\rangle + |0\rangle|-\rangle|+\rangle + |-\rangle|0\rangle|+\rangle + |-\rangle|+\rangle|0\rangle + |+\rangle|-\rangle|0\rangle)/\sqrt{6}$

となる。次に、全スピンを考えよう。

$$
\begin{aligned}
J_z &= J_{1z} + J_{2z} + J_{3z} \\
\boldsymbol{J}^2 &= (\boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 + \boldsymbol{J}_3)^2 \\
&= \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + \boldsymbol{J}_3^2 + 2\boldsymbol{J}_1 \cdot \boldsymbol{J}_2 + 2\boldsymbol{J}_2 \cdot \boldsymbol{J}_3 + 2\boldsymbol{J}_3 \cdot \boldsymbol{J}_1 \\
&= \boldsymbol{J}_1^2 + \boldsymbol{J}_2^2 + \boldsymbol{J}_3^2 + J_{1+}J_{2-} + J_{2+}J_{1-} + 2J_{1z}J_{2z} \\
&\quad + J_{2+}J_{3-} + J_{3+}J_{2-} + 2J_{2z}J_{3z} + J_{3+}J_{1-} + J_{1+}J_{3-} + 2J_{3z}J_{1z}
\end{aligned}
$$

であることを使って次の結果を得る。

1.

$$
\begin{aligned}
J_z|\alpha\rangle &= 3\hbar|\alpha\rangle \\
\boldsymbol{J}^{\,2}|\alpha\rangle &= 12\hbar^2|\alpha\rangle
\end{aligned}
$$

よって、$j=3, m=3$ となる。

2.

$$
\begin{aligned}
J_z|\beta\rangle &= 2\hbar|\beta\rangle \\
\boldsymbol{J}^{\,2}|\beta\rangle &= 12\hbar^2|\beta\rangle
\end{aligned}
$$

よって、$j=3, m=2$ となる。

3.

$$
\begin{aligned}
J_z|\gamma\rangle &= 0 \\
\boldsymbol{J}^{\,2}|\gamma\rangle &= 8\hbar^2|\gamma\rangle + 2\sqrt{6}\hbar^2|0\rangle|0\rangle|0\rangle
\end{aligned}
$$

よって、$m=0$ であるが $\boldsymbol{J}^{\,2}$ の固有状態ではない。

b. 空間部分が反対称的なのでスピン部分も反対称的でなければならない。(i),(ii) の場合は同じ状態の粒子が 2 個以上あるので、反対称的なスピン波動関数を作るのは不可能。(iii) の場合には、

$$
\begin{aligned}
|\delta\rangle = & \frac{1}{\sqrt{6}}(|+\rangle|0\rangle|-\rangle - |0\rangle|+\rangle|-\rangle \\
& +|0\rangle|-\rangle|+\rangle - |-\rangle|0\rangle|+\rangle + |-\rangle|+\rangle|0\rangle - |+\rangle|-\rangle|0\rangle)
\end{aligned}
$$

が存在し、$j=0, m=0$ となる。

問6　電子が **フェルミ・ディラック統計** に従うスピン 3/2 の粒子であったとする。このような「電子」からなる仮想的な Ne 原子（$Z = 10$）の電子配置を表せ［すなわち $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$ のように］。この配置は大いに **縮退** していることを示せ。この仮想的 Ne 原子の **基底状態**（最低項）は、交換分裂やスピン軌道分裂を考慮したとき、**分光学的記号** $^{2S+1}L_J$（S,L,J はそれぞれ全スピン、全軌道角運動量および全角運動量を表す）でどのように表されるか。

［解答］　「本当」の Ne 原子（$Z = 10$）は、フェルミ・ディラック統計に従うスピン $s = 1/2$ の電子からできているので、スピンによる多重度は $2s+1 = 2$ である。$(1s)$ と $(2s)$ は、$(2l+1)\times(2s+1) = 2$ 個の一電子状態からなり、$(2p)$ は、$(2l+1)\times(2s+1) = 6$ 個の一電子状態からなる。したがって、基底状態は $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$ となる。一電子状態は $(2p)$ まですべて詰まって閉殻を作っているので、Ne 原子の基底状態には縮退がない。

問題の仮想的な Ne 原子（$Z = 10$）は、フェルミ・ディラック統計に従うスピン $s = 3/2$ の「電子」からできているので、スピンによる多重度は $2s+1 = 4$ である。$(1s)$ と $(2s)$ は、$(2l+1)\times(2s+1) = 4$ 個の一電子状態からなり、$(2p)$ は、$(2l+1)\times(2s+1) = 12$ 個の一電子状態からなる。したがって、基底状態は $(1s)^4(2s)^4(2p)^2$ となる。$(2p)$ は、１２個の一電子状態の中２個が詰まっているので ${}_{12}C_2 = 66$ 重に縮退している。

「電子」はフェルミ・ディラック統計に従うので、全波動関数は「電子」の交換に対して **反対称** である。したがって、対称な全軌道角運動量関数 $l_{tot} = 0, 2$ には反対称のスピン関数 $s_{tot} = 0, 2$ が結びつき、反対称な全軌道角運動量関数 $l_{tot} = 1$ には対称のスピン関数 $s_{tot} = 1, 3$ が結びつく。基底状態の電子配置を、三角不等式 $|l_{tot} - s_{tot}| \le j \le l_{tot} + s_{tot}$ を考慮して求めれば、

$$
\begin{aligned}
l_{tot} &= 2, s_{tot} = 2 \quad {}^5D_0, {}^5D_1, {}^5D_2, {}^5D_3, {}^5D_4 \\
l_{tot} &= 2, s_{tot} = 0 \quad {}^1D_2 \\
l_{tot} &= 1, s_{tot} = 3 \quad {}^7P_2, {}^7P_3, {}^7P_4 \\
l_{tot} &= 1, s_{tot} = 1 \quad {}^3P_0, {}^3P_1, {}^3P_2 \\
l_{tot} &= 0, s_{tot} = 2 \quad {}^5S_2 \\
l_{tot} &= 0, s_{tot} = 0 \quad {}^1S_0
\end{aligned}
$$

となる。

つぎに、交換分裂やスピン軌道分裂を考慮したとき、上記の状態のうちどれがエネルギーが一番低くなるか考えよう。交換分裂を考えると、空間部分の波動関数が反対称であるほうがエネルギーが低い（教科書 510 頁

参照）。したがって、$l_{tot} = 1$である。さらに、**スピン軌道相互作用**

$$2\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S} = \boldsymbol{J}^2 - \boldsymbol{L}^2 - \boldsymbol{S}^2 = j_{tot}(j_{tot}+1) - l_{tot}(l_{tot}+1) - s_{tot}(s_{tot}+1)$$

を考えると、j_{tot}が小さくs_{tot}が大きいものほどよい。実際に計算してみると、${}^7P_2$が最低のエネルギー状態である。

問 7　2 個の同一種類のスピン 1/2 の **フェルミオン** が、無限に高い障壁ポテンシャル（$x < 0, x > L$ に対して $V = \infty$、$0 \le x \le L$ に対して $V = 0$）の間を 1 次元的に運動している。

a.　2 粒子が **三重項スピン状態 （ オルソ状態 ）** になっているとき、**基底状態** の波動関数と基底状態のエネルギーとを表せ。

b.　**一重項スピン状態 （ パラ状態 ）** のとき (a) と同じ問題を検討せよ。

c.　つぎに非常に到達距離が短く

$$V = -\lambda\delta(x_1 - x_2) \quad (\lambda > 0)$$

で近似できる引力ポテンシャルを通じて 2 粒子が相互作用していると仮定する。このような特異的ポテンシャルに対しても摂動論が有効であると仮定して、(a),(b) で得られたエネルギー準位がどのようになるかを半定量的に議論せよ。

［解答］ まず、一粒子状態のエネルギー固有関数とエネルギー固有値を求めると

$$\begin{aligned} \langle x|n\rangle &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \\ E_n &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2 \end{aligned}$$

となる。また、問題の粒子はスピン 1/2 なので、全体の波動関数は粒子の入れ替えに対して **反対称** である。

a. 波動関数のスピン部分は三重項（対称）なので、空間部分は反対称である。したがって、基底状態の波動関数とエネルギーは

$$\begin{aligned} |\text{基底状態}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|2\rangle - |2\rangle|1\rangle) \\ E &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(1^2 + 2^2) = \frac{5\hbar^2\pi^2}{2mL^2} \end{aligned}$$

となる。

b. 波動関数のスピン部分は一重項（反対称）なので、空間部分は対称である。したがって、基底状態の波動関数とエネルギーは

$$|\text{基底状態}\rangle = |1\rangle|1\rangle$$

$$E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(1^2+1^2) = \frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}$$

となる。

c. (a.) の基底状態に対して、1 次の摂動論でエネルギーのずれ ΔE は、

$$\Delta E = \langle \text{基底状態}|V|\text{基底状態}\rangle = 0$$

となる。基底状態の波動関数が反対称的なので 2 つの粒子は同じ位置に存在することはない。したがって、デルタ関数型の摂動によってはエネルギーが変化しない。このことは、摂動論が成り立つ限り高次の摂動に対しても正しい。

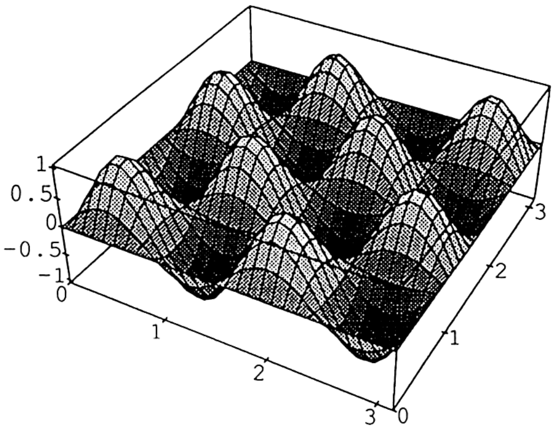
(b.) の基底状態に対して、1 次の摂動論でエネルギーのずれ ΔE は、

$$\Delta E = \langle \text{基底状態}|V|\text{基底状態}\rangle = -\frac{3}{2}\frac{\lambda}{L}$$

となる。基底状態の波動関数が対称的なので 2 つの粒子は同じ位置に存在できる。したがって、デルタ関数型の引力ポテンシャルによってエネルギーが下がる。

第 7 章

散乱理論



問 1 **リップマン－シュウィンガー方程式** は、到達距離が有限のポテンシャル、 ($0 < |x| < a$ に対してのみ) $V(x) \neq 0$、を持つ **1 次元の透過－反射問題** にも適用することができる。
a. 入射波 $\langle x|\phi\rangle = \exp(ikx)/\sqrt{2\pi}$ が左からやってくるとする。$x > a$ に対しては透過波のみが、$x < -a$ に対しては反射波とはじめからの波があるとすると、特異的な $1/(E - H_0)$ 演算子をどのように扱わなければならないか。$E \to E + i\varepsilon$ とする処方箋は依然正しいか。適切な **グリーン関数 (プロパゲーター)** の表式を求め、$\langle x|\psi^{(+)}\rangle$ に対する積分方程式を書け。

b. 引力的 δ - 関数ポテンシャル

$$V = -(\frac{\gamma\hbar^2}{2m})\delta(x), (\gamma > 0)$$

を持つ特別な場合を考える。積分方程式を解き透過振幅と反射振幅を求めよ。得られた結果を Gottfried, 1966, p.52 と照合せよ。

c. $\gamma > 0$ の 1 次元 δ- 関数ポテンシャルは、γ の任意の値に対して 1 個の (そしてただ 1 個の) **束縛状態** を可能にする。計算した透過・反射振幅は、 k を複素変数とみなしたとき予想されるところに束縛状態の極を持つことを示せ。

[解答]

a. H_0 の固有ケット $|\boldsymbol{k}\rangle(E = \hbar^2k^2/2m)$ を掛けると分母がゼロになってしまう特異的な演算子 $1/(E - H_0)$ にたいして、分母がゼロにならないようにするために $E \to E + i\varepsilon$ とする処方箋を用いる。すると、リップマン－シュウィンガー方程式 (7.1.6)

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}V|\psi^{(+)}\rangle$$

を得る。まず、自由粒子のグリーン関数を求めよう。

$$\begin{aligned} G_+(x,x') &= \frac{\hbar^2}{2m}\langle x|\frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon}|x'\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dp' \exp\left(i\frac{p'(x-x')}{\hbar}\right)\frac{1}{E - p'^2/2m + i\varepsilon} \\ &= \frac{-1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dk' \frac{\exp[ik'(x-x')]}{(k'-k-i\varepsilon')(k'+k+i\varepsilon')} \end{aligned}$$

$$= \frac{-1}{2\pi}\left[2\pi i \mathrm{Res}(\pm(k+i\varepsilon')\right] = \frac{-i}{2k}\exp\left(ik|x-x'|\right)$$

ただし $p' = \hbar k'$,$E = \hbar^2 k^2/2m$,$\varepsilon' = \varepsilon/2k$ として、$x > x'$ の時は複素平面の上半面で、$x < x'$ の時は下平面で経路を閉じて留数積分した。したがって、$\langle x|\psi^{(+)}\rangle$ に対するリップマン－シュウィンガー方程式は、

$$\langle x|\psi^{(+)}\rangle = \frac{\exp(ikx)}{\sqrt{2\pi}} - \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \frac{i}{2k}\exp(ik|x-x'|)V(x')\langle x'|\psi^{(+)}\rangle$$

となる。波動関数の規格化は、教科書の式 (7.1.31)、(7.1.32) に従った。

b. $V = -(\gamma\hbar^2/2m)\delta(x)$ を代入すると、

$$\langle x|\psi^{(+)}\rangle = \frac{\exp(ikx)}{\sqrt{2\pi}} + \gamma\frac{i}{2k}\exp(ik|x|)\langle 0|\psi^{(+)}\rangle$$

となり、この式に $x = 0$ を代入して、$\langle 0|\psi^{+}\rangle = \dfrac{1/\sqrt{2\pi}}{1 - i\gamma/2k}$ を得る。したがって、

$$\langle x|\psi^{+}\rangle = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\dfrac{1}{1-i\gamma/2k}\exp(ikx) & x \geq 0 \text{ のとき} \\ \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\exp(ikx) + \dfrac{i\gamma/2k}{1-i\gamma/2k}\exp(-ikx)\right) & x < 0 \text{ のとき} \end{cases}$$

となる。よって、**透過振幅** T と、**反射振幅** R は、

$$T = \frac{1}{1-i\gamma/2k}, \quad R = \frac{i\gamma/2k}{1-i\gamma/2k}$$

となる。

c. 第 2 章問 2 より、束縛状態の波動関数は

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2}}\exp\left(-\frac{\gamma}{2}|x|\right)$$

である。束縛状態に対応する k は、$k = i\gamma/2$ であるから、確かに透過・反射振幅は束縛状態に対応する一位の極をもつ。

問 2　次式を以下のそれぞれの方法で証明せよ。

$$\sigma_{\text{全体}} \approx \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int d^3x \int d^3x' V(r)V(r')\frac{\sin^2 k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}{k^2|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|^2}$$

a. **第一ボルン近似** を用いて計算した **微分断面積** を積分する。

b. 2次 のボルン近似の **前方散乱振幅** に、 **光学定理** を適用する。[1次のボルン近似を用いると $f(0)$ が実数であることに注意せよ。]

[解答]

a.　第1ボルン近似での微分断面積は、

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega'} &= |f^{(1)}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})|^2 \\
&= \left|-\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x \exp[i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}]V(r)\right|^2 \\
&= \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4}\int d^3x\int d^3x' \exp[i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]V(r)V(r')
\end{aligned}$$

となるが、

$$\begin{aligned}
&\int d\Omega' \exp\left[i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\right] \\
&= \exp[i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]\int d\Omega' \exp[-i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')] \\
&= \exp[i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]2\pi\int d(\cos\theta')\exp[-ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\cos\theta'] \\
&= \exp[i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]\frac{4\pi\sin k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}{k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \qquad (1)
\end{aligned}$$

であるから、

$$\begin{aligned}
\sigma_{\text{全体}} &= \int d\Omega' \frac{d\sigma}{d\Omega'} \\
&= \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int d^3x\int d^3x' \exp[i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')]\frac{\sin k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}{k|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}V(r)V(r')
\end{aligned}$$

となる。ポテンシャルが球対称なので、全断面積 $\sigma_{\text{全体}}$ が入射粒子の運動量 $\boldsymbol{k}$ の向きに依らないことに注意すると、

$$\sigma_{\text{全体}} = \frac{1}{4\pi}\int d\Omega \sigma_{\text{全体}}$$

と書けるから式 (1) と同じ計算をして、

$$\sigma_{全体} \approx \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int d^3x \int d^3x' V(r)V(r')\frac{\sin^2 k|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}{k^2|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|^2}$$

を得る。

b.

$$\begin{aligned}
\sigma_{全体} &= \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im} f^{(2)}(\theta = 0) \\
&\approx \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\frac{-2m}{4\pi\hbar^2}\int d^3x \int d^3x' \exp[i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}]V(r)\frac{2m}{\hbar^2}G_+(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')V(r')\exp[-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}'] \\
&= \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\mathrm{Im}\int d^3x \int d^3x' \exp[i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')]\frac{\exp(ik|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|)}{k|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}V(r)V(r')
\end{aligned}$$

a. と同様に $\sigma_{全体}$ が $\boldsymbol{k}$ の方向に依らないことに注意すると、

$$\begin{aligned}
\sigma_{全体} &\approx \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\mathrm{Im}\int d^3x \int d^3x' \frac{\sin k|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}{k|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}\frac{\exp(ik|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|)}{k|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}V(r)V(r') \\
&= \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int d^3x \int d^3x' V(r)V(r')\frac{\sin^2 k|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|}{k^2|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|^2}
\end{aligned}$$

を得る。

問 3　あるポテンシャル $V = 0$、（$r > R$ に対して）、$V = V_0 =$ 一定、（$r < R$ に対して）、を考える。V_0 は正でも負でもよい。

a. **部分波** の方法を用い $|V_0| \ll E = \hbar^2 k^2/2m$ かつ $kR \ll 1$ に対して、**微分断面積** が等方的であり全断面積が

$$\sigma_{全体} = \left(\frac{16\pi}{9}\right) \frac{m^2 V_0^2 R^6}{\hbar^4}$$

で与えられることを示せ。

b 次にエネルギーが少し増加したと仮定せよ。このとき角度分布は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = A + B\cos\theta$$

と表わせることを示せ。B/A の近似的表式を求めよ。

［解答］

a. 位相のずれは教科書の式 (7.6.34),(7.6.35) より、

$$\begin{aligned}
\tan\delta_l &= \frac{kRj_l'(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kRn_l'(kR) - \beta_l n_l(kR)} \\
\beta_l &= \left(\frac{r}{A_l}\frac{dA_l}{dr}\right)_{r=R} = \frac{k'Rj_l'(k'R)}{j_l(k'R)}
\end{aligned}$$

と表わせる。ただし $A_l(r) \propto j_l(k'R), \hbar^2 k'^2/2m = E - V_0$ を使った。**低エネルギー散乱** なので、$l = 0$ として、

$$\tan\delta_0 = \frac{kj_0'(kR)j_0(k'R) - k'j_0'(k'R)j_0(kR)}{kn_0'(kR)j_0(k'R) - k'j_0'(k'R)n_0(kR)}$$

さらに、$kR \ll 1$ を使って

$$\begin{aligned}
j_0(kR) &= \frac{\sin kR}{kR} \approx 1 - \frac{(kR)^2}{6} & j_0'(r) &\approx -\frac{1}{3}kR \\
n_0(kR) &= -\frac{\cos kR}{kR} \approx -\frac{1}{kR} + \frac{kR}{2} & n_0'(kR) &\approx \frac{1}{(kR)^2}
\end{aligned}$$

を代入すると、

$$\begin{aligned}
\tan\delta_0 &= \frac{1}{3}kR^3(k'^2 - k^2) \\
\delta_0 &= -\frac{2mV_0}{3\hbar^2}kR^3
\end{aligned}$$

したがって、

$$\begin{aligned}\sigma_{全体} &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l \approx \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 \\ &= (\frac{16\pi}{9})\frac{m^2V_0^2R^6}{\hbar^4}\end{aligned}$$

$l = 0$ でS波なので、微分断面積は等方的である。（$P_0(\cos\theta) = 1$ による。）

b. 次にエネルギーが少し増加した場合は、

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2}\sum_{l=0}\sum_{l'=0}(2l+1)(2l'+1)\exp(i\delta_l)\exp(-i\delta_l') \\ &\quad \times \sin\delta_l \sin\delta_l' P_l(\cos\theta)P_l'(\cos\theta)\end{aligned}$$

のうち、$(l, l') = (0,0), (1,0), (0,1)$ の3項をとると、角度分布は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \approx \frac{1}{k^2}(\sin^2\delta_0 + 6\cos(\delta_0-\delta_1)\sin\delta_0\sin\delta_1\cos\theta)$$

と書ける。従って、

$$\begin{aligned}A &= \frac{1}{k^2}\sin^2\delta_0 \\ B &= \frac{1}{k^2}6\cos(\delta_0-\delta_1)\sin\delta_0\sin\delta_1\end{aligned}$$

となり、

$$\frac{B}{A} = 6\cos(\delta_0-\delta_1)\frac{\sin\delta_1}{\sin\delta_0} \approx 6\frac{\delta_1}{\delta_0}$$

である。a. と同じように、

$$\tan\delta_1 = \frac{kj_1'(kR)j_1(k'R) - k'j_1'(k'R)j_1(kR)}{kn_1'(kR)j_1(k'R) - k'j_1'(k'R)n_1(kR)}$$

に、

$$\begin{aligned}j_1(r) &= \frac{\sin r}{r^2} - \frac{\cos r}{r} \approx \frac{1}{3}r - \frac{1}{30}r^3 \\ j_1'(r) &\approx \frac{1}{3} - \frac{1}{10}r^2 \\ n_1(r) &= -\frac{\cos r}{r^2} - \frac{\sin r}{r} \approx -\frac{1}{r^2} \\ n_1'(r) &\approx \frac{2}{r^3}\end{aligned}$$

を代入して、

$$
\begin{aligned}
\delta_1 &\approx \tan\delta_1 = \frac{1}{45}k^3R^5(k'^2k^2) \\
&= -\frac{2mV_0}{\hbar^2}\frac{1}{45}k^3R^5
\end{aligned}
$$

だから、B/A の近似式は、

$$
\frac{B}{A} \approx 6\frac{\delta_1}{\delta_0} = 6\frac{k^3R^5/45}{kR^3/3} = \frac{2}{5}(kR)^2
$$

となる。

問 4　スピンを持たない粒子が、弱い **湯川ポテンシャル**

$$V = \frac{V_0}{\mu r}\exp(-\mu r)$$

によって **散乱** される。$\mu > 0$ であるが V_0 は正でも負でもよい。本文で **第 1 ボルン振幅** が

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2\mu}\frac{1}{[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]}$$

で与えられることを示した。

a. $f^{(1)}(\theta)$ を用い $|\delta_l| \ll 1$ を仮定して、δ_l に対する表式を第 2 種のルジャンドル関数

$$Q_l(\zeta) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{P_l(\zeta')}{\zeta-\zeta'}d\zeta'$$

を用いて求めよ。

b. 展開式

$$\begin{aligned} Q_l(\zeta) \;=\; & \frac{l!}{1\cdot 3\cdot 5\cdot\cdots\cdots(2l+1)}\left\{\frac{1}{\zeta^{l+1}}+\frac{(l+1)(l+2)}{2(2l+3)}\frac{1}{\zeta^{l+3}}+\right. \\ & \left.\frac{(l+1)(l+2)(l+3)(l+4)}{2\cdot 4\cdot(2l+3)(2l+5)}\frac{1}{\zeta^{l+5}}+\cdots\cdots\right\},\ (|\zeta|>1) \end{aligned}$$

を用いて次のことを証明せよ。

1. ポテンシャルが斥力的（引力的）のとき δ_l は負（正）である。
2. ド・ブロイ波長がポテンシャルの到達距離よりずっと長いとき、δ_l は k^{2l+1} に比例する。比例定数をもとめよ。

［解答］

a. 教科書の式 (7.6.17) より、 **全散乱振幅** は **位相のずれ** δ_l を用いて

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l'=0}^{\infty}(2l'+1)\exp(i\delta_{l'})\sin\delta_{l'}P_{l'}(\cos\theta)$$

と書ける。両辺に $P_l(\cos\theta)$ を掛けて積分し、ルジャンドル多項式の **規格直交性**

$$\int_{-1}^{1}dx\,P_l(x)P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$$

を用いれば

$$
\begin{aligned}
&\int_{-1}^{1} d\cos\theta f(\theta) P_l(\cos\theta) = \\
&\quad \frac{1}{k}\sum_{l'=0}(2l'+1)\exp(i\delta_{l'})\sin\delta_{l'}\int_{-1}^{1} d\cos\theta P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \\
&= \frac{1}{k}\sum_{l'=0}(2l'+1)\exp(i\delta_{l'})\sin\delta_{l'}\frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \\
&= \frac{2}{k}\exp(i\delta_l)\sin\delta_l \approx \frac{2}{k}\delta_l, \quad (|\delta_l| \ll 1)
\end{aligned}
$$

を得る。ただし、上の式の $\delta_{ll'}$ は **クロネッカーのデルタ** である。したがって、位相のずれ δ_l が次のようにして得られる。

$$
\begin{aligned}
\delta_l &= \frac{k}{2}\int_{-1}^{1} d\cos\theta f(\theta) P_l(\cos\theta) \\
&= \frac{k}{2}\int_{-1}^{1} d\cos\theta P_l(\cos\theta)\frac{-2mV_0}{\hbar^2\mu}\frac{1}{[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]} \\
&= -\frac{mV_0}{\hbar^2\mu k}\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} d\zeta' \frac{P_l(\zeta')}{\left(1+\frac{\mu^2}{2k^2}\right)-\zeta'} \\
&= -\frac{mV_0}{\hbar^2\mu k} Q_l\left(1+\frac{\mu^2}{2k^2}\right) \qquad (1)
\end{aligned}
$$

b. 1. $Q_l(\zeta)$ の展開式より、$\zeta > 1$ ならば $Q_l(\zeta) > 0$ である。したがって、$Q_l(1+\mu^2/2k^2) > 0$ が言える。式 (1) より、ポテンシャルが斥力 (V_0 が正) ならば δ_l は負、ポテンシャルが引力 (V_0 が負) ならば δ_l は正になる。

2. ド・ブロイ波長 $(2\pi/k)$ がポテンシャルの到達距離 $(1/\mu)$ よりずっと長いとき、$\mu/k \gg 1$ となる。したがって、式 (1) と $Q_l(\zeta)$ の展開式を使って次式が得られる。

$$
\begin{aligned}
\delta_l &= -\frac{mV_0}{\hbar^2\mu k} Q_l\left(1+\frac{\mu^2}{2k^2}\right) \\
&= -\frac{mV_0}{\hbar^2\mu k}\frac{l!}{1\cdot 3\cdot 5\cdot\cdots\cdots(2l+1)}\left(\frac{2k^2}{\mu^2}\right)^{l+1} \\
&= -\frac{mV_0 2^{l+1}}{\hbar^2\mu^{2l+3}}\frac{l!}{1\cdot 3\cdot 5\cdot\cdots\cdots(2l+1)}k^{2l+1}
\end{aligned}
$$

> 問 5　$x - p_x$ 間の **不確定関係** を、**剛体球** $V = \infty (r > a), V = 0 (r < a)$ の内側に閉じ込められた粒子の **基底状態** に対して具体的に確かめよ。（ヒント：**球対称性** を利用せよ。）

［解答］球対称ポテンシャルに対しては、3 次元のシュレーディンガー方程式の代わりに **同値な 1 次元シュレーディンガー方程式**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u_{nl}}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right) u_{nl} = E u_{nl} \tag{1}$$

を解けばよい。ここで u_{nl} は動径方向の波動関数 $R_{nl}(r)$ を使って

$$u_{nl}(r) = r R_{nl}(r)$$

と定義され境界条件 $u_{nl}(r = 0) = 0$ を満たす。

式 (1) の括弧内の第 2 項は遠心力ポテンシャルを表す。**基底状態** は遠心力ポテンシャルのない $l = 0$ の状態になるので、以後 $l = 0$ の状態のみを考えることにして、$u_n(r) \equiv u_{nl=0}(r)$ と略記する。すると、本問のポテンシャルに対して同値な 1 次元シュレーディンガー方程式は、第 1 章の問 2 1 と全く等しくなるのでこれを利用できる。

定常状態のシュレーディンガー方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u_n}{dr^2} = E u_n(r)$$

を、境界条件

$$u_n(0) = u_n(a) = 0$$

のもとで解くと、規格化されたエネルギー固有関数

$$u_n(r) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi r}{a}\right) \qquad (n は正の整数)$$

を得る。

中心力場に束縛された粒子の波動関数の球対称性よりただちに、

$$\begin{aligned} \langle n, l = 0 | x | n, l = 0 \rangle &= 0 \\ \langle n, l = 0 | p_x | n, l = 0 \rangle &= 0 \end{aligned}$$

を得る。また、第１章問２１の結果を使えば

$$
\begin{aligned}
\langle n,l=0|x^2|n,l=0\rangle &= \frac{1}{3}\langle n,l=0|r^2|n,l=0\rangle \\
&= \frac{1}{3}\int_0^a dr u_n^*(r) r^2 u_n(r) = \frac{a^2}{9} - \frac{1}{6}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \\
\langle n,l=0|p_x^2|n,l=0\rangle &= \frac{1}{3}\langle n,l=0|p^2|n,l=0\rangle \\
&= \frac{1}{3}\int_0^a r^2 dr R_n^*(r)\left(-\frac{\hbar^2}{r}\frac{\partial^2 r R_n(r)}{\partial r^2}\right) \\
&= \frac{1}{3}\int_0^a dr u_n^*(r)\left(-\hbar^2\frac{\partial^2 u_n(r)}{\partial r^2}\right) = \frac{1}{3}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2
\end{aligned}
$$

となるので、不確定積は

$$
\begin{aligned}
\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p_x)^2\rangle &= (\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2)(\langle p_x^2\rangle - \langle p_x\rangle^2) \\
&= \frac{1}{9}\left(\frac{n^2\pi^2}{3} - \frac{1}{2}\right)\hbar^2 > \frac{\hbar^2}{4}
\end{aligned}
$$

となる。とくに、$n=1$ の場合が基底状態である。

【Q＆A】

Q： **第一ボルン近似** はエネルギーが高いほどよい近似のはずだが、第７章問４の b. の 2. のように低エネルギーの極限に用いてもよいのだろうか。

A：ボルン近似が適用できる条件は、ポテンシャルの及ぶ範囲で入射波の歪みが小さいことであった。この条件を満たせば、たとえ低エネルギーでもボルン近似は有効である。**湯川ポテンシャル** の場合、この条件は小さい k ($k \ll \mu$) に対して教科書 (7.2.13) 式より

$$
\frac{2m}{\hbar^2}|V_0| \ll \mu^2
$$

で与えられる。

問 6　侵入不可能な球

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r > a \\ \infty, & r < a \end{cases}$$

による粒子の散乱を考える。

a. s- 波（$l = 0$）の **位相のずれ** を表す式を導け。（この簡単な問題を解くのに、**球ベッセル関数** の詳しい性質を知る必要はない。）

b. 低エネルギーの極限 $k \to 0$ で、**全断面積** σ ［$\sigma = \int (d\sigma/d\Omega) d\Omega$］はいくらか。答を幾何学的断面積 πa^2 と比較せよ。次式を証明せずに用いてよい。

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= |f(\theta)|^2 \\ f(\theta) &= \left(\frac{1}{k}\right) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_l) \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \end{aligned}$$

［解答］

a. 球対称ポテンシャルの s 波散乱に対しては、3 次元のシュレーディンガー方程式の代わりに **同値な 1 次元シュレーディンガー方程式**

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u_0}{dr^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_0(r)$$

を解けばよい。ここで $u_0(r)$ は動径方向の波動関数 $R_{l=0}(r)$ を使って

$$u_0(r) = rR_{l=0}(r)$$

と定義され境界条件 $u_0(r = a) = 0$ を満たす。エネルギー固有関数は

$$u_0(r) = \begin{cases} N\sin(k(r-a)) & (r > a) \\ 0 & (r \le a) \end{cases} \tag{1}$$

となる。

ポテンシャルがないときは、上式で $a = 0$ とおいて

$$u_0(r) = N\sin(kr) \tag{2}$$

となるので、式 (1) と (2) を比較して、位相のずれは $\delta_0 = -ka$ となる。

b. $k \to 0$ のとき、 **s 波散乱** （$l = 0$ の **部分波** の散乱）だけが重要なので

$$\begin{aligned}\sigma &= \int d\Omega |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d\cos\theta \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) \\ &\quad \times \exp(i\delta_l)\sin\delta_l \exp(-i\delta_{l'})\sin\delta_{l'} P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \approx \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 = 4\pi a^2\end{aligned}$$

を得る。ただし、2 行目から 3 行目に移るさいにルジャンドル多項式の **規格直交性**

$$\int_{-1}^{1} dx P_l(x)P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}$$

を用いた。

低エネルギー極限 $(k \to 0)$ の断面積 $(4\pi a^2)$ は、幾何学的断面積 (πa^2) の 4 倍になって一致しない。低エネルギー極限では、粒子が長波長 $(\lambda \gg a)$ の波として散乱されるのに対して、幾何学的断面積とは古典的粒子（高エネルギー短波長 $\lambda \ll a$ で、球よりも小さい波束）の散乱断面積であるからだ。

問 7　$\delta_l = \Delta(b)|_{b=l/k}$ を用いて **高エネルギー散乱** に対する **位相のずれ** δ_l を、(a) **ガウス型ポテンシャル** $V(r) = V_0 \exp(-r^2/a^2)$ による場合および (b) **湯川ポテンシャル** $V(r) = V_0 \exp(-\mu r)/\mu r$ による場合に求めよ。l を増加させる（k を固定して）とき、$l \gg kR$ に対して δ_l が非常に速くゼロに近づくことを確かめよ。ここで R はポテンシャルの「到達距離」である。［$\Delta(b)$ に対する式は教科書 (7.4.14) 式

$$\Delta(b) = \frac{-m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} V(\sqrt{b^2+z^2})dz$$

で与えられる。］

［解答］ **アイコナール近似** では、粒子の **衝突径数** b は **角運動量** $\hbar l$ と関係式

$$\hbar l = pb = \hbar kb$$

で結び付けられるので、l 波の位相のずれ δ_l は衝突径数 b での位相のずれ $\Delta(b)$ を使って、

$$\delta_l = \Delta(b)|_{b=l/k} = \frac{-m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dz V(\sqrt{b^2+z^2})\bigg|_{b=l/k}$$

と表される。

a. ガウス型ポテンシャル $V(r) = V_0 \exp(-r^2/a^2)$ の場合

$$\begin{aligned}\delta_l &= \frac{-m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dz V_0 \exp\left(-\frac{b^2+z^2}{a^2}\right) \\ &= \frac{-m}{2k\hbar^2} V_0 a\sqrt{\pi}\exp\left(-\frac{b^2}{a^2}\right) \\ &= \frac{-m}{2k\hbar^2} V_0 a\sqrt{\pi}\exp\left(-\frac{l^2}{a^2k^2}\right)\end{aligned}$$

を得る。ポテンシャルの到達距離を a で定義すれば、$l \gg ka$ のとき上式の指数関数の因子により δ_l は急激にゼロに近づく。

b. 湯川ポテンシャル $V(r) = V_0 \exp(-\mu r)/\mu r$ の場合

$$\delta_l = \frac{-m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dz V_0 \frac{\exp\left(-\mu\sqrt{b^2+z^2}\right)}{\mu\sqrt{b^2+z^2}}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{-m}{2k\hbar^2}\frac{2V_0}{\mu}\int_1^\infty du\frac{\exp(-\mu bu)}{\sqrt{u^2-1}} \\
&= \frac{-m}{2k\hbar^2}\frac{2V_0}{\mu}K_0(\mu b) \\
&\approx \frac{-m}{2k\hbar^2}\frac{2V_0}{\mu}\sqrt{\frac{\pi}{2\mu b}}\exp(-\mu b), \quad (b\to\infty) \\
&\approx \frac{-m}{2k\hbar^2}\frac{2V_0}{\mu}\sqrt{\frac{\pi k}{2\mu l}}\exp(-\frac{\mu l}{k}), \quad (l\to\infty)
\end{aligned}
$$

を得る。ただし、ゼロ次の **変形ベッセル関数** $K_0(z)$ の積分表示と漸近形

$$
\begin{aligned}
K_0(z) &= \int_1^\infty du\frac{\exp(-zu)}{\sqrt{u^2-1}} \\
K_0(z) &\approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\exp(-z), \quad (z\to\infty)
\end{aligned}
$$

を用いた。変形ベッセル関数については、文献 [14] を参照せよ。ポテンシャルの到達距離を $1/\mu$ で定義すれば、$l \gg k/\mu$ のとき指数関数の因子により δ_l は急激にゼロに近づく。

問 8

a. 自由粒子 の グリーン関数 (プロパゲーター) の 球面波表示

$$\frac{\hbar^2}{2m}\langle \boldsymbol{x}\,|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\boldsymbol{x}\,'\rangle = \\ -ik\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}\,')j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>) \quad (1)$$

を証明せよ。ここで $r_<$ ($r_>$) は、r と r' の中、小さい方 (大きい方) を表す。

b. 球対称ポテンシャル の場合、**球面波** に対する **リップマン－シュウィンガー方程式** は

$$|Elm(+)\rangle = |Elm\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V|Elm(+)\rangle \quad (2)$$

のように表される。(a) を用いると $\boldsymbol{x}$ 表示で表したこの方程式から、次のような動径関数 $A_l(k;r)$ の方程式が導けることを示せ。

$$A_l(k;r) = j_l(kr) - \frac{2mik}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r')r'^2dr' \quad (3)$$

また、r を非常に大きくとり

$$f_l(k) = \exp(i\delta_l)\frac{\sin\delta_l}{k} = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int_0^\infty j_l(kr)A_l(k;r)V(r)r^2dr \quad (4)$$

を示せ。

［解答］

a. 自由粒子に対する、$\boldsymbol{x}$ 表示の **グリーン関数**

$$G_+(\boldsymbol{x}\,,\boldsymbol{x}\,') = \frac{\hbar^2}{2m}\langle \boldsymbol{x}\,|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\boldsymbol{x}\,'\rangle$$

を教科書の方法に沿って求めよう。ただし、教科書では H_0 の固有ケットとして平面波 $|\boldsymbol{p}\,\rangle$ をとって計算したが、ここでは H_0 の固有ケットとして球面波 $|k'l'm'\rangle$ をとって計算する。

球面波の **規格化** を

$$\langle k''l''m''|k'l'm'\rangle = \frac{1}{k'^2}\delta(k''-k')\delta_{l''l'}\delta_{m''m'}$$

のようにとり、 $E=\hbar^2k^2/2m$ とおけば、

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2}{2m}\langle k''l''m''|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|k'l'm'\rangle \\ &= \frac{1}{k^2-k'^2+i\epsilon}\frac{1}{k'^2}\delta(k''-k')\delta_{l''l'}\delta_{m''m'} \\ \langle \boldsymbol{x}\,|k'l'm'\rangle &= i^l\sqrt{\frac{2}{\pi}}j_{l'}(k'r)Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,)\end{aligned}$$

となる。これを使えば

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2}{2m}\langle \boldsymbol{x}\,|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\boldsymbol{x}'\,\rangle \\ =\;& \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{l'm'}\sum_{l''m''}\int_0^\infty k''^2dk''\int_0^\infty k'^2dk'\times \\ & \langle \boldsymbol{x}\,|k''l''m''\rangle\langle k''l''m''|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|k'l'm'\rangle\langle k'l'm'|\boldsymbol{x}\,'\rangle \\ =\;& \frac{2}{\pi}\sum_{l'm'}Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_{l'}^{m'*}(\hat{\boldsymbol{r}}\,')\int_0^\infty k'^2dk'\frac{j_{l'}(k'r)j_{l'}(k'r')}{k^2-k'^2+i\epsilon} \\ =\;& \frac{-1}{4\pi}\sum_{l'm'}Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_{l'}^{m'*}(\hat{\boldsymbol{r}}\,')\int_{-\infty}^\infty k'^2dk'\frac{1}{(k'-k-i\epsilon)(k'+k+i\epsilon)} \\ & \times\left[h_{l'}^{(1)}(k'r)h_{l'}^{(1)}(k'r')+h_{l'}^{(1)}(k'r)h_{l'}^{(2)}(k'r')+\right. \\ & \left.h_{l'}^{(2)}(k'r)h_{l'}^{(1)}(k'r')+h_{l'}^{(2)}(k'r)h_{l'}^{(2)}(k'r')\right] \\ =\;& \begin{cases}-ik\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}\,')j_l(kr)h_l^{(1)}(kr') & (r<r'\text{のとき}) \\ -ik\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}\,')j_l(kr')h_l^{(1)}(kr) & (r>r'\text{のとき})\end{cases}\end{aligned}$$

となる。ただし、

$$j_l(x)=\frac{1}{2}(h_l^{(1)}(x)+h_l^{(2)}(x))$$

を用いたあと、k について留数積分した。したがって、

$$\begin{aligned}&\frac{\hbar^2}{2m}\langle \boldsymbol{x}\,|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\boldsymbol{x}'\,\rangle = \\ &\qquad -ik\sum_l\sum_m Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{r}}\,')j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)\end{aligned}$$

が示された。

b. 式 (2) に左から $\langle \boldsymbol{x}\,|$ をかけて、$\boldsymbol{x}$ 表示のリップマン・シュウィンガー方程式

$$\begin{aligned} &\langle \boldsymbol{x}\,|Elm(+)\rangle \qquad (5)\\ &= \langle \boldsymbol{x}\,|Elm\rangle + \langle \boldsymbol{x}\,|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V|Elm(+)\rangle \\ &= \langle \boldsymbol{x}\,|Elm\rangle + \int d^3\boldsymbol{x}\,'\langle \boldsymbol{x}\,|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\boldsymbol{x}\,'\rangle V(r')\langle \boldsymbol{x}\,'|Elm(+)\rangle \qquad (6)\end{aligned}$$

を得る。波動関数は、球座標表示で

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{x}\,|Elm(+)\rangle &= c_l A_l(k;r) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,) \\ \langle \boldsymbol{x}\,|Elm\rangle &= c_l j_l(kr) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,) \end{aligned} \qquad (7)$$

と書ける。ただし、$c_l = \frac{i^l}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}}$ は規格化定数である。式 (1) と式 (7) を式 (5) に代入して両辺を c_l でわれば

$$\begin{aligned} &A_l(k;r)Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,) \\ &= j_l(kr)Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,) \\ &\quad -\frac{2mik}{\hbar^2}\int d^3\boldsymbol{x}\,'\sum_{l'm'} Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,')j_{l'}(kr_<)h_{l'}^{(1)}(kr_>) \\ &\quad \times V(r')A_l(k;r')Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,') \qquad (8)\\ &= j_l(kr)Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,) \\ &\quad -\frac{2mik}{\hbar^2}\sum_{l'm'} Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,)\int_0^\infty r'^2dr' j_{l'}(kr_<)h_{l'}^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r') \\ &\quad \times \int d\Omega' Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,')Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,') \qquad (9)\\ &= j_l(kr)Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,) \\ &\quad -\frac{2mik}{\hbar^2}Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,)\int_0^\infty r'^2dr' j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r') \qquad (10)\end{aligned}$$

となる。ただし、2 行目から 3 行目に移るときに **球面調和関数の完全性**

$$\int d\Omega Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,)Y_{l'}^{m'}(\hat{\boldsymbol{r}}\,) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

を用いた。式 (10) の両辺を $Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}\,)$ でわって、求める式

$$A_l(k;r) = j_l(kr) - \frac{2mik}{\hbar^2}\int_0^\infty r'^2dr' j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')A_l(k;r') \qquad (11)$$

を得る。

また、$r \to \infty$ のときの $j_l(r), h_l^{(1)}(r)$ の漸近形（教科書付録A 5 および文献 [14] を参照）

$$
\begin{aligned}
j_l(z) &\to \frac{1}{z}\cos\left[z - \frac{(l+1)\pi}{2}\right] \\
h_l^{(1)}(z) &\to \frac{1}{z}\exp\left[i\left(z - \frac{(l+1)\pi}{2}\right)\right]
\end{aligned}
$$

を式 (11) に代入すれば、$r_> = r, r_< = r'$ だから

$$
\begin{aligned}
&A_l(k;r) \\
&\approx \frac{1}{2kr}\left(\exp\left[i\left(kr-(l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right] + \exp\left[-i\left(kr-(l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right]\right) \\
&\quad -\frac{2mik}{\hbar^2}\frac{1}{kr}\exp\left[i\left(kr-(l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right]\int_0^\infty r'^2 dr' j_l(kr')V(r')A_l(k;r') \\
&= \frac{1}{2kr}\exp\left[-i\left(kr-(l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right] + \frac{1}{2kr}\exp\left[i\left(kr-(l+1)\frac{\pi}{2}\right)\right] \qquad (12) \\
&\quad \times\left(1 - \frac{4mik}{\hbar^2}\int_0^\infty r'^2 dr' j_l(kr')V(r')A_l(k;r')\right)
\end{aligned}
$$

となる。ポテンシャルがない場合（$V(r) = 0$）と比べて、ポテンシャルが存在すると外向き **球面波** $\exp[i(kr-(l+1)\pi/2)]/2kr$ の係数が

$$
1 \to 1 + 2ikf_l(\theta) \qquad (13)
$$

と変化するはずだから、式 (12) と式 (13) を比較して

$$
f_l(k) = \exp(i\delta_l)\frac{\sin\delta_l}{k} = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int_0^\infty r^2 dr j_l(kr)A_l(k;r)V(r)
$$

を得る。

問 9　斥力的 δ 殻ポテンシャル

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) V(r) = \gamma\ \delta(r - R),\quad (\gamma > 0) \tag{1}$$

による散乱を考える。

a. s- 波の **位相のずれ** δ_0 を $k(E = \hbar^2 k^2/2m)$ の関数として決める方程式をたてよ。

b. 次に γ が

$$\gamma \gg \frac{1}{R}, k \tag{2}$$

のように非常に大きいとする。

1. $\tan kR$ がゼロに近く ない とき、s- 波の位相のずれは教科書本文で議論した **剛体球** の結果と似ていることを示せ。
2. また $\tan kR$ がゼロに近い（が厳密にゼロではない）とき、**共鳴** 的ふるまいが起こりうることを示せ。すなわち k を増加させると $\cot \delta_0$ は正の側からゼロを通過する。
3. $1/\gamma$ のオーダーの項を残し、共鳴の位置を近似的に決めよ。これらの共鳴を、同じ半径の球面の 内側 に

$$V = 0,\quad r < R;\quad V = \infty,\quad r > R \tag{3}$$

によって閉じ込められた粒子の束縛状態のエネルギーと比較せよ。

4. また

$$\Gamma = \frac{-2}{[d(\cot \delta_0)/dE]|_{E=E_r}} \tag{4}$$

で定義される **共鳴幅** Γ の近似式を求め、特に γ が大きくなると共鳴が極めて鋭くなることに注目せよ。

［解答］

a. s 波に対する **同値な 1 次元シュレーディンガー方程式**

$$-\frac{d^2 u}{dr^2} + \gamma\delta(r - R)u(r) = k^2 u(r) \tag{5}$$

を解いて位相のずれを求めよう。ここで u は動径方向の波動関数 $R(r)$ を使って $u(r) = rR(r)$ と定義され境界条件 $u(r = 0) = 0$ を満たす。

領域 $r<R$ と $r>R$ の解は、容易にもとまって

$$
\begin{aligned}
u(r) &= a\sin kr, \quad (r<R) &(6)\\
u(r) &= \sin[k(r-R)+\eta] \quad (r>R) &(7)
\end{aligned}
$$

と書ける。ただし、位相のずれを $\delta_0=-kR+\eta$、殻の内側の振幅を a とおいた。この 2 つの定数は、$r=R$ での波動関数の接続条件

$$
\begin{aligned}
u(R+0) &= u(R-0) &(8)\\
\left(\frac{du}{dr}\right)_{r=R+0}-\left(\frac{du}{dr}\right)_{r=R-0} &= \gamma u(R) &(9)
\end{aligned}
$$

によって決められる。式 (9) は、式 (5) を $r=R$ の周りの微小区間で積分して得られる。式 (6,7) を式 (8,9) に代入すると、

$$
\begin{aligned}
a\sin kR &= \sin\eta &(10)\\
k\cos\eta-ka\cos kR &= \gamma a\sin kR &(11)
\end{aligned}
$$

から、

$$
\begin{aligned}
a &= \frac{1}{\sqrt{[\cos kR+(\gamma/k)\sin kR]^2+\sin^2 kR}} &(12)\\
\tan\eta &= \frac{\tan kR}{1+(\gamma/k)\tan kR} &(13)
\end{aligned}
$$

を得る。したがって、位相のずれは、k の増加に対してなめらかに変化する背景散乱による位相のずれ $-kR$ と共鳴的な振る舞いを表す位相のずれ η の和

$$\delta_0=-kR+\eta=-kR+\arctan\left[\frac{\tan kR}{1+(\gamma/k)\tan kR}\right]$$

で与えられる。η が共鳴の前後で π だけ変化することに注意せよ。

b. 1. $k/\gamma\ll 1$ で $\tan(kR)$ がゼロに近くないので、

$$\tan\eta\approx\left(\frac{k}{\gamma}\right)\ll 1$$

となる。よって、

$$\delta_0\approx -kR+n\pi$$

となって、s 波の位相のずれは剛体球の結果 $\delta_0\approx -kR$ と似ている。問 6 (a) の結果および教科書の式 (7.6.44) を参照せよ。

2. 共鳴の近傍では、δ_0 は小さい側から $\pi/2+n\pi$ を横切る。いいかえれば、$\cot\delta_0$ は正の側からゼロを通過することを示そう。式 (10)、(11) より

$$\cot\delta_0 = \cot(-kR+\eta) \;=\; \frac{1+(\gamma/2k)\sin(2kR)}{-(\gamma/k)\sin^2(kR)} \tag{14}$$

となる。分母は常に負であり、$(\gamma/2k)\gg 1$ であるから、

$$2kR = 2n\pi - \frac{2k}{\gamma} \tag{15}$$

のとき $\cot\delta_0$ が正の側からゼロを通過し、共鳴的な振舞いが起こる。

3. したがって、共鳴を起こすエネルギーは

$$k \;=\; \frac{n\pi}{R+1/\gamma} \approx \frac{n\pi}{R}(1-\frac{1}{\gamma R}) \tag{16}$$

$$E \;\approx\; \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{R}\right)^2(1-\frac{2}{\gamma R}) \tag{17}$$

によって与えられる。これは、球面の内側に閉じ込められた粒子の $l=0$ 状態のエネルギー

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{R}\right)^2$$

とほぼ一致する。

また、条件 (15) が成り立つとき、式 (12) より、粒子が共鳴して殻の内側に一時的に閉じこめられる振幅が非常に大きくなることがわかる。

4.

$$\begin{aligned}
\Gamma \;&=\; \frac{-2}{\left.\dfrac{d(\cot\delta_0)}{dE}\right|_{E=E_r}} = \frac{-2}{\left.\dfrac{d(\cot\delta_0)}{dk}\dfrac{dk}{dE}\right|_{E=E_r}} \\
&=\; \left.\frac{-2(\hbar^2/m)k\sin^4(kR)}{(R-\gamma^{-1})\sin^2(kR)-2Rk^2/\gamma^2}\right|_{E=E_r} \\
&\approx\; \frac{1}{\gamma^2}\frac{2\hbar^2}{Rm}k^3 = \frac{1}{\gamma^2}\frac{2\hbar^2}{Rm}\left(\frac{n\pi}{R}\right)^3
\end{aligned}$$

を得る。γ が大きくなると、共鳴幅 Γ は $1/\gamma^2$ に比例して小さくなり、共鳴が鋭くなる。

問１０　スピンを持たない粒子が、**時間に依存するポテンシャル**

$$V(\boldsymbol{r},t) = V(\boldsymbol{r})\cos\omega t$$

によって散乱される。遷移振幅をポテンシャルの１次まで計算すると、散乱粒子のエネルギーは $\hbar\omega$ だけ増加ないし減少することを示せ。$d\sigma/d\Omega$ を求めよ。高次の項を考慮するとどのようなことが起こるか。定性的に議論せよ。

［解答］　時間に依存する摂動論を用いて考えよう。遠い過去に状態ケットが $|\boldsymbol{k}\rangle$ で表されていると仮定する。相互作用が

$$V = V(\boldsymbol{r})\cos\omega t\exp(\eta t)$$

のようにゆっくりとかけられると、時刻 t に $|\boldsymbol{k}\rangle$ 以外の運動量固有ケット $|\boldsymbol{k}'\rangle$ に状態が見いだされる確率振幅は、１次の摂動の範囲で

$$\begin{aligned}
\langle\boldsymbol{k}'|U_I^{(1)}(t,-\infty)|\boldsymbol{k}\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt'\langle\boldsymbol{k}'|V_I(t')|\boldsymbol{k}\rangle \\
&= -\frac{i}{\hbar}\langle\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle\int_{-\infty}^{t} dt'\exp(\eta t')\cos\omega t'\exp\left(i\frac{E'-E}{\hbar}t\right) \\
&= -\frac{i}{\hbar}\langle\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle\frac{1}{2}\left[\frac{\exp\left[\eta t + i(E'-E+\hbar\omega)t/\hbar\right]}{\eta+(i/\hbar)(E'-E+\hbar\omega)}\right. \\
&\quad\left. + \frac{\exp\left[\eta t + i(E'-E-\hbar\omega)t/\hbar\right]}{\eta+(i/\hbar)(E'-E-\hbar\omega)}\right]
\end{aligned}$$

となる。したがって、$|\boldsymbol{k}'\rangle$ に状態が見いだされる確率は、

$$\begin{aligned}
&|\langle\boldsymbol{k}'|U_I^{(1)}(t,-\infty)|\boldsymbol{k}\rangle|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar^2}|\langle\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle|^2\frac{1}{4}\left[\frac{\exp(2\eta t)}{\eta^2+(E'-E+\hbar\omega)^2/\hbar^2} + \frac{\exp(2\eta t)}{\eta^2+(E'-E-\hbar\omega)^2/\hbar^2}\right. \\
&\quad\left. +2\mathrm{Re}\frac{\exp(2\eta t+2i\omega t)}{[\eta+(i/\hbar)(E'-E+\hbar\omega)][\eta-(i/\hbar)(E'-E-\hbar\omega)]}\right] \qquad (1)
\end{aligned}$$

となる。よって、$\eta\to 0$（t は有限）としたときの遷移率 $w_{\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}'}$ は、

$$\begin{aligned}
&w_{\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}'} \qquad (2) \\
&= \frac{d}{dt}|\langle\boldsymbol{k}'|U_I^{(1)}(t,-\infty)|\boldsymbol{k}\rangle|^2
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{\hbar^2}|\langle \boldsymbol{k}\,'|V|\boldsymbol{k}\,\rangle|^2 \frac{1}{4}\left[\frac{2\eta\exp(2\eta t)}{\eta^2+(E'-E+\hbar\omega)^2/\hbar^2}+\frac{2\eta\exp(2\eta t)}{\eta^2+(E'-E-\hbar\omega)^2/\hbar^2}\right] \\
&= \frac{1}{4}\frac{2\pi}{\hbar}|\langle \boldsymbol{k}\,'|V|\boldsymbol{k}\,\rangle|^2\left[\delta(E'-E+\hbar\omega)+\delta(E'-E-\hbar\omega)\right] \qquad (3)
\end{aligned}
$$

となる。ただし、公式

$$
\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{x^2+\eta^2}=\pi\delta(x)
$$

を用い、式 (1) の振動項は平均すればゼロになるとして無視した。

したがって、$|\boldsymbol{k}\,\rangle$ から立体角要素 $d\Omega$ 内にある一群の状態 $|\boldsymbol{k}\,'\rangle$ への遷移率 w は、式 (2) に **箱型規格化** での状態密度をかければ、$E' = E \pm \hbar\omega$ に対してそれぞれ

$$
\begin{aligned}
w &= \frac{1}{4}\frac{2\pi}{\hbar}|\langle \boldsymbol{k}\,'|V|\boldsymbol{k}\,\rangle|^2\delta(E'-E\pm\hbar\omega)\left(\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\frac{k'm}{\hbar^2}dEd\Omega\right) \\
&= \frac{1}{4}\frac{2\pi}{\hbar}|\langle \boldsymbol{k}\,'|V|\boldsymbol{k}\,\rangle|^2\left(\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\frac{k'm}{\hbar^2}d\Omega\right) \qquad (4)
\end{aligned}
$$

となる。ただし、

$$
k' = k_{\pm} = \sqrt{\frac{2m(E\pm\hbar\omega)}{\hbar}}
$$

は、散乱後の粒子の波数である。

箱型規格化では 入射流束 = 速度/体積 = $\hbar k/mL^3$ であるから **微分断面積** は、終状態のエネルギーを区別しないで **観測** すると

$$
\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{\text{遷移率}}{\text{流束}\cdot d\Omega} \\
&= \frac{1}{4}\left|\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\boldsymbol{x}\;V(\boldsymbol{x}\,)\exp\left[i(\boldsymbol{k}\;-\boldsymbol{k}\,')\cdot\boldsymbol{x}\,\right]\right|^2\times\left(\frac{k_+}{k}+\frac{k_-}{k}\right)
\end{aligned}
$$

となる。

以上の結果をシュレーディンガー表示の波動関数を使って、定性的にまとめてみよう。ドブロイの関係

$$
\begin{aligned}
E &= \hbar\omega \\
P &= \hbar k
\end{aligned}
$$

より、入射粒子 $|k,t\rangle$ の波動関数 $\exp[i\boldsymbol{k}\;\cdot\boldsymbol{x}\;-i(E/\hbar)t]$ は、摂動ポテンシャルの影響を受けるまでは角振動数 $E/\hbar$ で時間的に振動している。1次

の摂動を受けた粒子 $V|k,t\rangle$ の波動関数は

$$\begin{aligned}\cos\omega t\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right) &= \frac{1}{2}[\exp(-i\omega t)+\exp(+i\omega t)]\exp(-i\frac{E}{\hbar}t)\\ &= \frac{1}{2}\left(\exp\left[-i\left(\frac{E}{\hbar}+\omega\right)t\right]+\exp\left[-i\left(\frac{E}{\hbar}-\omega\right)t\right]\right)\end{aligned}$$

と、$E/\hbar\pm\omega$ の二つの角振動数の重ねあわせとして表される。すなわち、1 回だけ摂動を受けた散乱粒子はポテンシャルと $\hbar\omega$ のエネルギー量子を受け渡しすることが分かる。このことは、教科書第 5 章 6 節の調和摂動と全く同じである。

2 次の摂動を受けると波動関数は、だいたい

$$\begin{aligned}&\cos\omega t\cos\omega t\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)\\ &= \frac{1}{4}[\exp(-i\omega t)+\exp(+i\omega t)]^2\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)\\ &= \frac{1}{4}[\exp(-2i\omega t)+2+\exp(+2i\omega t)]\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)\\ &= \frac{1}{2}\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)+\frac{1}{4}\exp\left[-i\left(\frac{E}{\hbar}+2\omega\right)t\right]+\frac{1}{4}\exp\left[-i\left(\frac{E}{\hbar}-2\omega\right)t\right]\end{aligned}$$

となり、$E/\hbar$ および $E/\hbar\pm2\omega$ の三つの角振動数の重ねあわせとして表される。すなわち、2 次の摂動を受けた散乱粒子はポテンシャルと $\hbar\omega$ のエネルギー量子を 2 回受け渡しすることが分かる。散乱後の粒子は、量子を 2 回受け取った場合 $E+2\hbar\omega$、2 回渡した場合 $E-2\hbar\omega$、量子を 1 個受け取ってから返した場合と渡してから返してもらった場合に E のエネルギーを持つことになる。

高次の摂動を受けたときも、同様に考えることによって散乱後のエネルギーの変化 $\Delta E=E'-E$ について次のことが言える。

1. $(2n+1)$ 次の摂動を受けたとき

$$\Delta E=\pm\hbar\omega,\pm3\hbar\omega,\pm5\hbar\omega,\cdots,\pm(2n+1)\hbar\omega$$

2. $(2n)$ 次の摂動を受けたとき

$$\Delta E=0,\pm2\hbar\omega,\pm4\hbar\omega,\cdots,\pm(2n)\hbar\omega$$

【別解】　［解答］では、計算の結果でてきた振動項を無理やり無視して答を導いた。［解答］では粒子が平面波であると理想化したため、時

刻 t において系がまだ時間的に振動する摂動ポテンシャル V の影響を受けている。つまり、散乱後の粒子ではなくて、散乱中の粒子を観測していることになる。このことが、振動項が生じた原因である。

実際の実験では、粒子の **波束** が無限遠（粒子線源）から運動量 $\boldsymbol{k}$ の **自由粒子** として飛んで来て、ポテンシャル V の存在する領域に到達し、そこで散乱されて、運動量 $\boldsymbol{k}'$ の自由粒子として無限遠（測定装置）に到達する。

このような状況を正確に記述するには、始状態と終状態などを **波束** の波動関数にとって理論を構成すればよい。しかし、波束は H_0 の固有状態でないので、このような理論は複雑になり分かりにくい。そこで一般に、摂動ポテンシャルを衝突時間 $\Delta t = 2/\eta$ だけ作用させることで、波束の効果を代用する。すなわち、ポテンシャルを

$$V(\boldsymbol{r}, t) \to V(\boldsymbol{r}, t) \exp(-\eta|t|) \tag{5}$$

と置き換える。ただし、η は正である。波束の大きさを広げてゆけば、波束は平面波に近付いてゆき、衝突時間は長くなる（$\Delta t \to \infty$）。したがって、遷移率は

$$\begin{aligned} w_{\boldsymbol{k} \to \boldsymbol{k}'} &= |\langle \boldsymbol{k}'|U_I(\eta; +\infty, -\infty)|\boldsymbol{k}\rangle|^2/\Delta t \\ & |\langle \boldsymbol{k}'|U_I(\eta; +\infty, -\infty)|\boldsymbol{k}\rangle|^2 \times 2\eta \end{aligned}$$

で、$\eta \to +0$ の極限（ **断熱的スイッチ・オフ** ）をとれば得られる。時間発展演算子が式 (5) の置き換えをとおして η に依存することを示すために $U_I(\eta; \infty, -\infty)$ と書いた。

さて、本問の場合、摂動の 1 次までとれば遷移振幅は

$$\begin{aligned} &\langle \boldsymbol{k}'|U_I^{(1)}(+\infty, -\infty)|\boldsymbol{k}\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt' \langle \boldsymbol{k}'|V_I(t')|\boldsymbol{k}\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle \boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \exp(-\eta|t'|)\cos\omega t' \exp\left(i\frac{E'-E}{\hbar}t\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle \boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle \times \left[\int_{-\infty}^{0} dt' \exp(\eta t')\cos\omega t' \exp\left(i\frac{E'-E}{\hbar}t\right)\right. \\ &\qquad \left. + \int_{0}^{+\infty} dt' \exp(-\eta t')\cos\omega t' \exp\left(i\frac{E'-E}{\hbar}t\right)\right] \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle \boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle \left(\frac{\eta}{\eta^2 + (E'-E-\hbar\omega)^2/\hbar^2}\right. \end{aligned}$$

$$+\frac{\eta}{\eta^2+(E'-E+\hbar\omega)^2/\hbar^2}\Bigg)$$

となる。粒子とポテンシャルの衝突時間が $\Delta t = 2/\eta$ であることを考慮すれば、遷移率

$$\begin{aligned} w &= |\langle \boldsymbol{k}\,'|U_I^{(1)}(+\infty,-\infty)|\boldsymbol{k}\,\rangle|^2/\Delta t \\ &= \frac{1}{2\hbar^2}|\langle \boldsymbol{k}\,'|V|\boldsymbol{k}\,\rangle|^2 \\ &\times \Bigg[\frac{\eta^2}{\eta^2+(E'-E-\hbar\omega)^2/\hbar^2}\cdot\frac{\eta}{\eta^2+(E'-E-\hbar\omega)^2/\hbar^2} \\ &\quad+\frac{2\eta^2}{\eta^2+(E'-E+\hbar\omega)^2/\hbar^2}\cdot\frac{\eta}{\eta^2+(E'-E-\hbar\omega)^2/\hbar^2} \\ &\quad+\frac{\eta^2}{\eta^2+(E'-E+\hbar\omega)^2/\hbar^2}\cdot\frac{\eta}{\eta^2+(E'-E+\hbar\omega)^2/\hbar^2}\Bigg] \end{aligned}$$

を得る。公式

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{x^2+\eta^2}=\pi\delta(x)$$

を使えば、上の式の括弧内の三つの項は $\eta\to 0$ の極限で

$$\begin{aligned} \text{第1項} &\to \frac{\eta^2}{\eta^2+(E'-E-\hbar\omega)^2/\hbar^2}\pi\hbar\delta(E'-E-\hbar\omega) \\ &\to \pi\hbar\delta(E'-E-\hbar\omega) \\ \text{第2項} &\to 2\eta\pi^2\hbar^2\delta(E'-E-\hbar\omega)\delta(E'-E+\hbar\omega) \\ &\to 0 \\ \text{第3項} &\to \frac{\eta^2}{\eta^2+(E'-E+\hbar\omega)^2/\hbar^2}\pi\hbar\delta(E'-E+\hbar\omega) \\ &\to \pi\hbar\delta(E'-E+\hbar\omega) \end{aligned}$$

となるので、最終的に式 (2)

$$w_{\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}\,'}=\frac{1}{4}\frac{2\pi}{\hbar}|\langle \boldsymbol{k}\,'|V|\boldsymbol{k}\,\rangle|^2\left[\delta(E'-E+\hbar\omega)+\delta(E'-E-\hbar\omega)\right]$$

が、振動項を無視するようなことをせずに得られる。あとは、［解答］と同様にして微分断面積を求めることができる。

【Q＆A】

Q： **ブラッグ反射** とは何か？

A：結晶の格子間隔程度のドブロイ波長をもった電子線、中性子線、X 線などを結晶にあてると **回折条件**

$$\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{G}$$

をみたす方向に強く反射される。これが、ブラッグ反射である。ただし、上式で $\hbar\boldsymbol{k}$ は入射波の運動量ベクトル、$\hbar\boldsymbol{k}'$ は反射波の運動量ベクトル、$\boldsymbol{G}$ は結晶の **逆格子ベクトル** である。

第７章問１０で時間的に振動するポテンシャル $V(\boldsymbol{x},t) = V(\boldsymbol{x})\cos\omega t$ による散乱を考察したようにシュレーディンガー表示の波動関数をつかって、回折条件を定性的もとめよう。結晶の周期ポテンシャルは、逆格子ベクトル $\boldsymbol{G}$ をつかって

$$V(\boldsymbol{x}) = \sum_{\boldsymbol{G}} V_{\boldsymbol{G}} \exp(\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x})$$

とフーリエ展開される。ドブロイの関係

$$E = \hbar\omega$$
$$P = \hbar k$$

より、運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ の入射粒子 $|k,t\rangle$ の波動関数 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - i(E/\hbar)t}$ は、摂動ポテンシャルの影響を受けるまえは波数 $\boldsymbol{k}$ で空間的に振動している。１次の摂動を受けた粒子 $V|k,t\rangle$ の波動関数は

$$V_{\boldsymbol{G}} \exp(i\boldsymbol{G}\cdot\boldsymbol{x})\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) = V_{\boldsymbol{G}} \exp(i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G})\cdot\boldsymbol{x})$$

となり波数 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}$ の波動関数して表される。すなわち、１回だけ摂動を受けた散乱粒子は結晶ポテンシャルと $\hbar\boldsymbol{G}$ の **結晶運動量** を受け渡しすることがわかる。これが、回折の運動学的理論とよばれるものである。結晶と入射波の相互作用が強い場合には、高次の摂動を取り入れた動力学的理論をつかう必要がある。

問１１　**水素原子** の **基底状態** による **高速電子の弾性散乱** に対する **微分断面積** は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{4m^2e^4}{\hbar^4 q^4}\right)\left\{1 - \frac{16}{[4+(qa_0)^2]^2}\right\}^2$$

で与えられることを示せ（電子の同一性の効果は無視せよ）。

［解答］水素原子（$Z=1$）の基底状態による高速電子の弾性散乱に対する微分断面積は、教科書の式 (7.12.15) で $k=k'$ として

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(0\to 0) = \frac{4m_e^2}{\hbar^4}\frac{e^4}{q^4}\left|-1+F_0(\boldsymbol{q}\ )\right|^2$$

で与えられるので、

$$F_0(\boldsymbol{q}\ ) = \langle 0|e^{i\boldsymbol{q}\ \cdot\boldsymbol{x}}\ |0\rangle = \int d^3\boldsymbol{x}\ \langle 0|\boldsymbol{x}\ \rangle e^{i\boldsymbol{q}\ \cdot\boldsymbol{x}}\ \langle\boldsymbol{x}\ |0\rangle$$

$$= \int d^3\boldsymbol{x}\ e^{i\boldsymbol{q}\ \cdot\boldsymbol{x}}\ |\langle\boldsymbol{x}\ |0\rangle|^2 = \int d^3\boldsymbol{x}\ e^{i\boldsymbol{q}\ \cdot\boldsymbol{x}}\ \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}\right)^2 e^{-2r/a_0}$$

を求めればよい。この積分は、第５章問３９の積分で

$$L\to 1,\ \boldsymbol{p}\ \to -\hbar\boldsymbol{q}\ ,\ a_0\to a_0/2$$

と置き換えて $1/8\sqrt{\pi}a_0^{3/2}$ をかけたものであるから、

$$F_0(\boldsymbol{q}\ ) = \frac{16}{[4+(qa_0)^2]^2}$$

を得る。

弾性散乱の微分断面積は、大角散乱 ($q\ \to\ \infty$) では **ラザフォード散乱** に近付き、小角散乱 $q\to 0$ では急激にラザフォード散乱より小さくなる。衝突径数の小さい入射電子は核のクーロン力を直接受け大角散乱されるのに対し、衝突径数の大きい入射電子は原子の束縛電子に遮蔽されたポテンシャルによって小角散乱されるからである。

問１２　中心力の場の中で運動している１粒子のエネルギーを $E(J_1, J_2, J_3)$ とする。(J_1, J_2, J_3) は３個の作用変数である。
(1) **クーロンポテンシャル** に対して、E の関数形はどのように限定されるか。

(2) 作用変数と角変数で記述する方法を用いて中心力の場における **縮退** とクーロン場の問題を比較せよ。

(3) また、ルンゲ・レンツベクトル

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p} + e^2\mu\hat{\boldsymbol{r}}$$

と関連させよ。(μ は換算質量)

(4) ハミルトニアンが

$$H = \frac{p^2}{2\mu} + V(r) + F(\boldsymbol{A}^2)$$

であるとき、いま述べてきたことはどのように変わるか。

(5) 量子論で中心力の場における縮退とクーロン場の問題での縮退を対応させて、通常の量子数 (n, l, m) および量子数 (j, m_1, m_2) を用いて記述せよ。ここで第２の組 (j, m_1, m_2) は波動関数 $\mathcal{D}^j_{m_1m_2}(\alpha\beta\gamma)$ を区別するものである。

(6) 波動関数 $\mathcal{D}^j_{m_1m_2}(\alpha\beta\gamma)$ は球面調和関数にラゲール関数をかけたものと、どのように関係しているか。

以下、参考文献 [12, 3] にしたがって解説する。

（１）　ハミルトニアンを極座標系で書くと

$$H = \frac{1}{2\mu}\left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} + \frac{p_\phi^2}{r^2\sin^2\theta}\right) + V(r)$$

であるから、ハミルトンの主関数を

$$S(r, \theta, \phi, t) = W_r(r) + W_\theta(\theta) + W_\phi(\phi) - Et$$

と置くと、ハミルトン・ヤコビの偏微分方程式

$$H = \frac{1}{2\mu}\left[\left(\frac{\partial S}{\partial r}\right)^2 + \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}\right)^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial S}{\partial \phi}\right)^2\right] + V(r) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$$

は変数分離できて、

$$\frac{\partial W_\phi}{\partial \phi} = M$$

$$\left(\frac{\partial W_\theta}{\partial \theta}\right)^2 + \frac{M^2}{\sin^2\theta} = L^2$$

$$\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\partial W_r}{\partial r}\right)^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) = E$$

となる。ただし、M, L は分離のための定数で、それぞれ、軌道角運動量の z 成分、軌道角運動量の大きさという物理的意味を持つ。

作用変数 J_α は $p_\alpha = \partial W_\alpha/\partial \alpha$ を一周期にわたって積分して、

$$J_\phi = \oint p_\phi d\phi = 2\pi M \tag{1}$$

$$J_\theta = \oint p_\theta d\theta = 2\int d\theta\sqrt{L^2 - \frac{M^2}{\sin^2\theta}} = 2\pi(L - |M|) \tag{2}$$

$$J_r = \oint p_r dr = 2\int dr\sqrt{2\mu\left(E - V(r)\right) - \frac{L^2}{r^2}} \tag{3}$$

$$= -2\pi\left(L - \sqrt{\frac{\mu e^4}{-2E}}\right) \quad \left[V(r) = -\frac{e^2}{r} \text{ のとき}\right] \tag{4}$$

となる。上式を M, L, E について解くと

$$M = \frac{J_\phi}{2\pi}$$

$$L = \frac{1}{2\pi}(|J_\phi| + J_\theta)$$

$$E = \frac{-2\pi^2\mu e^4}{(J_r + J_\theta + |J_\phi|)^2}$$

を得る。よってクーロンポテンシャルの場合エネルギーは

$$E = E(J_r + J_\theta + |J_\phi|)$$

の関数形をしている。クーロン場以外の中心力のときは、式 (3) は式 (4) のような関数形にはならないので、一般に

$$E = E(J_r, J_\theta + |J_\phi|)$$

という関数形である。

（2） エネルギーの関数形と縮退度の関係を考えよう。ボーア・ゾンマーフェルトの半古典量子化条件は

$$\begin{aligned} J_\phi &= mh, \quad -(k+|m|) \le m \le (k+|m|) \\ J_\theta &= kh, \quad k = 0, 1, 2, \cdots \\ J_r &= n'h, \quad n' = 1, 2, 3, \cdots \end{aligned}$$

であるから、角運動量の大きさを

$$L = l\hbar = \frac{1}{2\pi}(J_\theta + |J_\phi|) = (k+|m|)\hbar$$

と書けば、中心力場におけるエネルギーの一般形は

$$E = E(J_r, J_\theta + |J_\phi|) = E(n', k+|m|) = E(n', l) \tag{5}$$

となる。条件式 $-l \le m \le l$ より $k+|m|$ が特定の l の値になるような量子状態 (m, k) の組は $2l+1$ 組あることが分かる。したがって、式 (5) よりエネルギーは $2l+1$ 重に縮退している。

とくに、クーロン力の場合は、$n = n' + l$ とおけばエネルギーの関数形が

$$E = E(J_r + J_\theta + |J_\phi|) = E(n' + k + |m|) = E(n' + l) = E(n) \tag{6}$$

となる。$n' + l$ が特定の n の値になるような量子状態 (n', l) の組は n 組あり、それぞれの組が $2l+1$ 重に縮退している。したがって、式 (6) よりエネルギーは

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

となって、n^2 に縮退していることが分かる。さらに、電子のスピンに関する縮退度 2 を考慮すれば、元素の周期律表に表れる周期 $2n^2$ が説明される。（量子力学の原子分子への応用については、文献 [6] を参考にせよ。）

（3）　保存量とエネルギーの関数形、縮退度との関係を調べてみよう。中心力場では、軌道角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ を時間微分すると

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} &= \frac{d}{dt}(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) = \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} \times \boldsymbol{p} + \boldsymbol{r} \times \frac{d\boldsymbol{p}}{dt} \\ &= \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F} = \boldsymbol{r} \times (F(r)\hat{\boldsymbol{r}}) = 0\end{aligned}$$

となって、軌道角運動量が中心力場での保存量であることが示される。電子の位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ はつねに軌道角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ に垂直なので、電子は $\boldsymbol{L}$ に垂直な平面内を運動する。このとき極座標系で電子の座標 ϕ が決まれば、座標 θ も決まるので、$\phi(t)$ の周期 $1/\nu_\phi$ と $\theta(t)$ の周期 $1/\nu_\theta$ は等しい。したがって作用変数で書いた運動方程式

$$\nu_\alpha = \frac{\partial H}{\partial J_\alpha}$$

より

$$\frac{\partial H(J_r, J_\theta, J_\phi)}{\partial J_\phi} = \frac{\partial H(J_r, J_\theta, J_\phi)}{\partial J_\theta}$$

となる。このことから、ハミルトニアンの関数形は、

$$E = H = H(J_r, J_\theta + |J_\phi|)$$

となったのであった。中心力場以外のポテンシャルでは $\boldsymbol{L}$ は保存しないので、軌道は平面内に限定されず

$$E = H(J_r, J_\theta, J_\phi)$$

である。

とくに、クーロン場の場合は、軌道角運動量の他にルンゲ・レンツベクトル $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p} + e^2\mu\hat{\boldsymbol{r}})$ も保存されることを示そう。$\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}$ を時間微分すると

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p}) &= \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{F} = \boldsymbol{L} \times (-\frac{e^2}{r^3}\boldsymbol{r}) \\ &= -\frac{e^2}{r^3}(\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{r}) = -\frac{e^2}{r^3}((\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) \times \boldsymbol{r}) \\ &= -\frac{e^2}{r^3}[r^2\boldsymbol{p} - \boldsymbol{r}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p})] = -e^2\mu\frac{d\hat{\boldsymbol{r}}}{dt}\end{aligned}$$

よって、

$$\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = \frac{d}{dt}(\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{p} + e^2\mu\hat{\boldsymbol{r}}) = 0$$

となって、ルンゲ・レンツベクトル $\boldsymbol{A}$ がクーロン場での保存量であることが示される。ただし、

$$\begin{aligned}\mu\frac{d\hat{\boldsymbol{r}}}{dt} &= \mu\frac{d}{dt}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) = \frac{\mu}{r}\dot{\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{r}\left(-\frac{\mu}{r^2}\frac{dr}{dt}\right)\\ &= \frac{1}{r^3}[r^2\boldsymbol{p} - \boldsymbol{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})]\end{aligned}$$

を用いた。

つぎに、ルンゲ・レンツベクトル $\boldsymbol{A}$ と軌道 $\boldsymbol{r}$ の関係を見てみよう。$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L} = 0$ より、$\boldsymbol{A}$ は軌道面内にある。$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{r}$ の内積をとると

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r} + e^2\mu r$$

であるが、

$$(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{L} = -L^2$$

に注意すると、$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{r}$ のなす角を θ として

$$|\boldsymbol{A}||\boldsymbol{r}|\cos\theta = -L^2 + e^2\mu r$$

を得る。動径 r について解いて、軌道の方程式

$$\frac{1}{r} = \frac{e^2\mu}{L^2}(1 - \epsilon\cos\theta)$$

を得る。ただし、ϵ は離心率で、

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^2 &= (\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p} + e^2\mu\hat{\boldsymbol{r}})^2\\ &= (\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})^2 + 2e^2\mu(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}) + e^4\mu^2\\ &= L^2p^2 + \frac{2e^2\mu}{r}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{L}) + e^4\mu^2\\ &= 2\mu L^2\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r}\right) + e^4\mu^2\end{aligned} \tag{7}$$

を使って、

$$\epsilon = \frac{|\boldsymbol{A}|}{e^2\mu} = \sqrt{1 + \frac{2L^2E}{e^4\mu}}$$

と表される。したがって、ルンゲ・レンツベクトル $\boldsymbol{A}$ が保存されるクーロン力の場合、$\boldsymbol{A}$ を長軸に持った楕円軌道をとる。このとき、軌道が閉じているので $\phi(t), \theta(t)$ の周期 $1/\nu_\phi = 1/\nu_\theta$ と $r(t)$ の周期 $1/\nu_r$ が等しい。したがって、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial H}{\partial J_r} &= \frac{\partial H}{\partial J_\theta} = \frac{\partial H}{\partial J_\phi} \\
E = H &= H(J_r + J_\theta + |J_\phi|)
\end{aligned}
$$

となる。これが古典力学におけるクーロン場の対称性である。中心力 $\boldsymbol{F}$ がクーロン力からずれると、ベクトル $\boldsymbol{A}$ は保存せず、

$$
\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} = \boldsymbol{L} \times \boldsymbol{F} + e^2\mu \frac{d\hat{\boldsymbol{r}}}{dt} \neq 0
$$

にしたがって変化するので、楕円の軸がずれてゆき電子は歳差運動を行う。したがって、軌道が閉じていないので $\phi(t), \theta(t)$ の周期と $r(t)$ の周期は異なり、縮退は解ける。

（4）ハミルトニアンを

$$
H = H_0 + F(\boldsymbol{A}^2)
$$

と書こう。式 (7) より、ポアッソン括弧式は

$$
\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \{\boldsymbol{L}, H\} = \{\boldsymbol{L}, H_0\} + \{\boldsymbol{L}, F(\boldsymbol{A}^2)\} = 0
$$

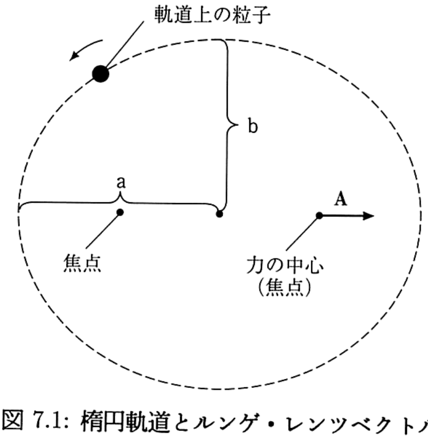


図 7.1: 楕円軌道とルンゲ・レンツベクトル $\boldsymbol{A}$

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{A}}{dt} &= \{\boldsymbol{A}\ ,H\} = \{\boldsymbol{A}\ ,H_0\} + \{\boldsymbol{A}\ ,F(\boldsymbol{A}^{\ 2})\} \\ &= \{\boldsymbol{A}\ ,H_0\}\begin{cases} =0 & \text{クーロン場のとき} \\ \neq 0 & \text{非クーロン場のとき}\end{cases}\end{aligned}$$

となる。（１）、（２）の議論では、エネルギーの縮退はベクトル $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{A}$ の保存によって決まったので、$F(\boldsymbol{A}^{\ 2})$ の項が加わっても、（１）、（２）の結果はそのまま変わらない。

（５）つぎに、文献 [12] に沿って、量子力学の立場から考えてみよう。角運動量ベクトルとルンゲ・レンツベクトルに対応するエルミート演算子は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L} &= \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{A} &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{L}\ \times\boldsymbol{p}\ -\boldsymbol{p}\ \times\boldsymbol{L}\ ) + e^2\mu\hat{\boldsymbol{r}}\end{aligned}$$

となる。新しい演算子

$$\boldsymbol{M}\ = \sqrt{\frac{1}{-2\mu H}}\boldsymbol{A}$$

を定義すると、演算子 $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{M}$ は、つぎの交換関係を満たす。

$$\begin{aligned}[L_i, L_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \\ [M_i, M_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}L_k \\ [L_i, M_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}M_k\end{aligned}$$

これは 4 次元ユークリッド空間 $(x_0, \boldsymbol{x}\ )$ における回転 $O(4)$ の生成演算子の交換関係と一致する。M_i は x_0x_i 平面内の回転を生成する。これが量子力学におけるクーロン場の対称性である [11, 26]。ここで、

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J} &= \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{L}\ +\boldsymbol{M}\ ) \\ \boldsymbol{K} &= \tfrac{1}{2}(\boldsymbol{L}\ -\boldsymbol{M}\ )\end{aligned} \qquad (8)$$

を定義すれば、二つの独立な 3 次元角運動量の交換関係

$$\begin{aligned}[J_i, J_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \\ [K_i, K_j] &= i\hbar\epsilon_{ijk}K_k \\ [J_i, K_j] &= 0\end{aligned}$$

を得る。ただし、$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M}=0$であったことを思い出すと、

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{M}=(\boldsymbol{J}+\boldsymbol{K})(\boldsymbol{J}-\boldsymbol{K})=\boldsymbol{J}^2-\boldsymbol{K}^2=0$$

より、$\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{K}^2$ という条件が付く。

一方、演算子として $\boldsymbol{A}^2$ を計算すると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^2 &= 2\mu H(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)+e^4\mu^2\\ \boldsymbol{M}^2 &= \frac{e^4\mu^2}{-2\mu H}-\boldsymbol{L}^2-\hbar^2\end{aligned}$$

となるので、ハミルトニアン H について解いて

$$\begin{aligned}H &= -\frac{1}{2}\frac{e^4\mu}{\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{M}^2+\hbar^2}=-\frac{1}{2}\frac{e^4\mu}{2(\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{K}^2)+\hbar^2}\\ &= -\frac{1}{2}\frac{e^4\mu}{4\boldsymbol{J}^2+\hbar^2}\end{aligned}$$

を得る。演算子 $\boldsymbol{J}$ は、角運動量の演算子と同じ交換関係を満たすので、$\boldsymbol{J}^2$ の固有値は $j(j+1)\hbar^2$、$j=0,1/2,1,3/2,\cdots$ となる。したがって、

$$\begin{aligned}E(j) &= -\frac{1}{2}\frac{e^4\mu}{[4j(j+1)+1]\hbar^2}\\ &= -\frac{1}{2}\frac{e^4\mu}{(2j+1)^2\hbar^2}\\ &= -\frac{1}{2}\frac{e^4\mu}{\hbar^2}\frac{1}{N^2}\end{aligned}$$

となって、水素原子のスペクトルの縮退を得た。ただし、$N=2j+1=1,2,3,\cdots$ と置いた。このとき、互いに交換する演算子 $H,\boldsymbol{J}^2(=\boldsymbol{K}^2),J_z,K_z$ の同時固有ケット $|jm_1m_2\rangle$ が存在して、

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2|jm_1m_2\rangle &= j(j+1)\hbar^2|jm_1m_2\rangle\\ J_z|jm_1m_2\rangle &= m_1\hbar|jm_1m_2\rangle\\ K_z|jm_1m_2\rangle &= m_2\hbar|jm_1m_2\rangle\\ H|jm_1m_2\rangle &= E(j)|jm_1m_2\rangle\end{aligned}$$

となる。ただし、$-j\le m_1\le j,\quad -j\le m_2\le j$ である。一つの $E(j)$ に対して m_1,m_2 が $2j+1$ 通りあるので、エネルギーは $(2j+1)^2=N^2$ 重に縮退している。

一方、一般の中心力の場合は、互いに交換する演算子 $H, \boldsymbol{L}^2, L_z$ の同時固有ケット $|nlm\rangle$ が存在して、

$$\begin{aligned} H|nlm\rangle &= E(nl)|nlm\rangle \\ \boldsymbol{L}^2|nlm\rangle &= l(l+1)\hbar^2|nlm\rangle \\ L_z|nlm\rangle &= m\hbar|nlm\rangle \end{aligned}$$

となる。ただし、$-l \leq m \leq l$ である。一つの $E(nl)$ に対して m が $2l+1$ 通りあるので、エネルギーは $2l+1$ 重に縮退している。

（6）クーロン場の固有ケット $|jm_1m_2\rangle$ は、極座標における固有ケット $|nlm\rangle$ を使って、

$$\begin{aligned} |jm_1m_2\rangle &= \sum_{nlm}\langle nlm|jm_1m_2\rangle|nlm\rangle \\ &= \sum_{lm}\langle lm|m_1m_2\rangle|nlm\rangle \\ &= \sum_{l=0}^{n-1}\langle l, m_1+m_2|m_1m_2\rangle|nlm\rangle \end{aligned}$$

と表される。ただし、$n = 2j+1$ である。式 (8) より

$$\begin{aligned} \boldsymbol{L} &= \boldsymbol{J} + \boldsymbol{K} \\ \boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{K}^2 &= j(j+1)\hbar^2 \end{aligned}$$

となることに注意すると、変換係数 $\langle lm|m_1m_2\rangle$ は大きさが j の二つのスピン $\boldsymbol{J}$ と $\boldsymbol{K}$ を合成して大きさが l のスピンを作るときのクレプシュ・ゴルダン係数であることがわかる。

一方、クーロン場の固有ケット $|jm_1m_2\rangle$ の運動量表示は、ウィグナー関数を使って、

$$\langle \boldsymbol{p}\,|jm_1m_2\rangle \sim \langle \alpha, \beta, \gamma|jm_1m_2\rangle = \mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma)$$

と表される。ただし、オイラー角 (α, β, γ) は、$p_o^2/2\mu = -E$ で p_0 を定義したときに運動量ベクトル $\boldsymbol{p}$ から第 2 章問 2 のユニタリー変換によって定義される回転のオイラー角である。したがって、波動関数 $\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma)$ は、球面調和関数にラゲール関数をかけたもののフーリエ変換 $\phi_{nlm}(\boldsymbol{p}\,)$ と

クレプシュ・ゴルダン係数で結ばれる。[25, 26]

$$
\begin{aligned}
\mathcal{D}^{(j)}_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma) &\sim \langle \boldsymbol{p} \; | j m_1 m_2 \rangle \\
&\sim \sum_{lm} \langle lm | m_1 m_2 \rangle \phi_{nlm}(\boldsymbol{p} \;)
\end{aligned}
$$

参考文献

[1] 並木美喜雄：「量子力学入門－現代科学のミステリー」、岩波新書、岩波書店

[2] 大槻義彦：「ＳＦ量子論入門－ψの魔術とはなにか」、ブルーバックス、講談社

一般むけの縦書きの量子力学の入門書。

[3] 朝永振一郎：「量子力学Ｉ（第二版）」、みすず書房（１９８１）

歴史的発展を追う形の教科書。量子力学が作り上げられて行く過程を追体験できる。

[4] 野村昭一郎、阿部正紀：「演習・セミナーによる量子力学入門」、コロナ社

波動方程式の解き方など量子力学の初歩を習得するのに最適。

[5] 砂川重信：「散乱の量子論」岩波全書、岩波書店

散乱理論の詳しい教科書。

[6] Ｐ．Ｓ．Ｃ．マシューズ著、首藤紘一、首藤健一訳：「原子と分子の量子論」、廣川書店（１９９１）

[7] 小林俊一：「固体物理」、パリティ物理学コース、丸善

[8] F．ハルツェン、A．D．マーチ著、小林澈郎、広瀬立成訳：「クォークとレプトン」、培風館

[9] ハーケン著、松原武生、村尾剛訳：「固体の場の量子論（上下）」、吉岡書店
素粒子論、および場の量子論（の固体物理学へ応用）の入門書。どちらも、豊富な練習問題を解いてゆくことにより無理なく読み通すことができる。本書の次に読むのに最適。

[10] F．ライフ著、中山寿夫、小林祐次訳：「熱統計物理学の基礎（上中下）」、吉岡書店

[11] H．ゴールドスタイン著、瀬川富士、矢野忠、江沢康生訳：「新版古典力学（上下）」、吉岡書店

[12] "Nonrelativistic Mechanics", R.J.Finkelstein, W.A.Benjamin, 1973

量子力学と密接に結びついて発展してきた統計物理学・古典力学の教科書。

[13] 並木美喜雄：「デルタ関数と微分方程式」、岩波書店

[14] ジョージ・アルフケン：「ベクトル・テンソルと行列」、「関数論」、「特殊関数と積分方程式」；権平健一郎、神原武志、小川直人訳、講談社
量子力学で使う数学が分かりやすく解説されている。

[15] H．ジョージアイ著、九後汰一郎訳：「物理学におけるリー代数 — アイソスピンから統一理論へ —」、物理学叢書５８、吉岡書店（１９９０）
題名の通り、物理へのリー代数の応用の入門書。

[16] Proceedings of International Symposium, Foundations of Quantum Mechanics — in the Light of New Technology — , 日本物理学会（１９８３、１９８６、１９８９、１９９２）
量子力学の基礎に関する国際会議の会議録（４巻）。量子力学の発展に関する最新の情報を知ることができる。

[17] 渡辺力：「巨大原子核で何が起こるか」、物理学最前線１巻、共立出版

[18] W.Greiner, B.Müller and J.Rafelski:"Quantum Electrodynamics of Strong Fields—with an Introduction into Modern Relativistic Quantum Mechanics—",Springer-Verlag
巨大原子核が引き起こす、量子力学のパラドクスを解説している。

[19] 藤本文範：「チャネリング・ブロッキング」、物理学最前線１５巻、共立出版
イオンビームの固体による散乱に関する入門書。

[20] Ｌ．Ｐ．レヴィ著、鹿児島誠一訳、「メソスコピック構造における永久電流」、パリティ（丸善）１９９２年4月号１０２ページ
Ｌ．Ｐ．レヴィ著、大塚洋一訳、「なんと、常伝導金属を流れる永久電流！」、パリティ（丸善）１９９２年１０月号４０ページ

[21] V.Chandrasekhar et al., "Magnetic Response of a Single, Isolated Gold Loop", Physical Review Letters, p.3578, Vol.67(25) (1991).

[22] "Quantum Coherence in Mesoscopic Systems", edited by B.Kramer, NATO ASI Series B:Physics Vol.254, Plenum Press, New York, 1991.

「普通の金属」を流れる永久電流に関する最近の研究成果。

[23] A．エカート著、井元信之訳、「量子暗号理論への招待」、パリティ（丸善）１９９２年２月号２６ページ

[24] Artur K. Ekert,"Quantum Cryptography Based on Bell's Theorem", Pysical Review Letters, p.661, Vol.67(6) (1991).
ベルの不等式の「量子暗号」への応用。

[25] D.Park,"Relation Between Parabolic and Spherical Eigenfunctions of Hydrogen",Zeitschrif für Physik, p.1551, Vol.159 (1960).

[26] J.W.B.Hughes,"Stark states and O(4) symmetery of hydrogenic atoms",Proc. Phys. Soc., p.810, Vol.91 (1967).

放物座標と球座標を使った水素原子波動関数の関係に関する論文。

[27] D．E．クヌース著、有澤誠訳：「クヌース先生のドキュメント纂法」、
共立出版（１９８９）
TEX の作者のクヌース教授による、コンピュータを使って本を作る方法。

謝辞

つぎの方々に心からの謝意を表したい。

演習の時間に一緒に問題を考えてくれた３年生の諸君は、ときおり全く予期しない種類の質問をして著者を立ち往生させた。修士１年であったの酒井英樹君と氷沢和也君は、ＴＡとして演習の授業を支えてくれた。また、自主ゼミに参加した、犬宮誠治君、木元祐二君、小浦寛之君、鈴木順君、曽田康秀君、高橋伸子君、田中治雄君、鳥居隆君、柴田康平君、堀田弘志君、安井久一君にも感謝したい。この本のほんとうの著者は、これらのひとびとである。また、丸山耕司君は魅力的な挿絵を描いてくれた。

桜井明夫教授は、問題解説編の出版をこころよく許してくださり、いろいろと貴重なご意見をくださった。小池文博博士は、解答作成にあたり文献を紹介してくださった。吉岡書店の上川正司氏は、出版に必要なあらゆることを世話してくださった。

著者らに大きな影響を与えてくださった、早稲田大学の先生方にはなんと感謝してよいかわからない。並木美喜雄教授は、学部３年生のときに量子力学の不思議な世界に導いてくださった。大場一郎教授が私に量子力学演習の授業を勧めてくださらなかったら、本書は存在しなっかたであろう。大槻義彦教授は、私が学部４年生のときから今日まで暖かく見守ってくださったばかりでなく、本書を監修してくださった。

１９９２年9月　飯高敏晃

索引

演習現代の量子力学　1992 ©

1992年12月20日　第1刷発行
2011年3月25日　第8刷発行

監　修　大槻義彦
著者代表　飯高敏晃
発行者　吉岡　誠

〒606-8225 京都市左京区田中門前町87
株式会社 吉岡書店
電話(075)781-4747/振替 01030-8-4624

(物理学叢書・別巻)

藤原製本株式会社印刷事業部

ISBN 978-4-8427-0243-8